

Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería

Versión a Distancia

*Transmisión de
Calor*

Apuntes



Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

**CURSO DE MÁSTER EN MÉTODOS
NUMÉRICOS PARA CÁLCULO Y DISEÑO
EN INGENIERÍA**



Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

Profesores

**Eugenio Oñate
Francisco Zárate**



Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

ÍNDICE

1 LA ECUACIÓN GENERAL DE TRANSMISIÓN DEL CALOR	1
1.1 INTRODUCCIÓN	1
1.2 ECUACIONES BÁSICAS DE LA TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONDUCCIÓN	2
1.2.1 Conceptos básicos sobre la transmisión del calor	2
1.2.2 Conducción del calor	3
1.3 OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE BALANCE TÉRMICO	7
1.4 CONDICIONES DE CONTORNO INICIALES	8
2 CONDUCCIÓN DEL CALOR ESTACIONARIA	11
2.1 INTRODUCCIÓN	11
2.2 ECUACIONES BÁSICAS	11
2.3 FORMULACIÓN DE ELEMENTOS FINITOS	12
2.3.1 Expresión de residuos ponderados de Galerkin	14
2.4 EXPRESIONES DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$ PARA EL TRIÁNGULO LINEAL	16
2.4.1 Matriz de rigidez $\mathbf{K}^{(e)}$	16
2.5 EXPRESIÓN DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$ PARA EL TETRAEDRO LINEAL	18
2.5.1 MATRIZ $\mathbf{K}^{(e)}$	18
2.5.2 Vector de flujos nodales equivalentes	20
2.6 FORMA MATRICIAL DE LAS ECUACIONES DE MEF	21
2.7 FORMULACIÓN ISOPARAMÉTRICA	23
2.8 INTEGRACIÓN NUMÉRICA EN TRES DIMENSIONES	25
2.8.1 Elementos hexaédricos	25
2.8.2 Elementos tetraédricos	26
2.8.3 INTEGRACIÓN NUMÉRICA DE LAS MATRICES Y VECTORES DEL ELEMENTO	27
2.9 PROGRAMACIÓN DEL CÁLCULO DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$	28
2.9.1 Subrutina para cálculo de la matriz de rigidez $\mathbf{K}^{(e)}$	28
2.9.2 Subrutina para cálculo del vector de flujos nodales por generación de calor	29

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

3	PROBLEMAS TRANSITORIOS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONDUCCIÓN	31
3.1	INTRODUCCIÓN	31
3.2	ECUACIONES BÁSICAS	32
3.3	OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE LA DISCRETIZACIÓN EN EL ESPACIO	32
3.4	MATRIZ DE CAPACIDAD TÉRMICA DIAGONAL	34
3.5	INTEGRACIÓN EN EL TIEMPO	36
3.5.1	Integración con elementos finitos en el tiempo	36
3.5.2	Integración en el tiempo por el método de diferencias finitas	39
3.6	ESTABILIDAD DE LA SOLUCIÓN TRANSITORIA	40
4	TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN	45
4.1	INTRODUCCIÓN	45
4.2	LA SOLUCIÓN DE CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN DEL CALOR ESTACIONARIA	46
4.2.1	Discretización en elementos finitos	46
4.2.2	Expresiones para el elemento unidimensional de dos nodos	47
4.2.3	Un sencillo ejemplo de inestabilidad numérica	48
4.2.4	Esquema de difusión artificial	50
4.2.5	Esquema de diferencias finitas contracorriente	52
4.2.6	Relación entre el esquema de diferencias contracorrientes y el de difusión artificial	53
4.2.7	Esquema de Petrov-Galerkin	53
4.2.8	Equivalencia entre los esquemas de Petrov-Galerkin y de difusión artificial	55
4.2.9	Método de mínimos cuadrados de Galerkin	56
4.2.10	Método de multiescalas	56
4.3	MÉTODO DE CÁLCULO FINITESIMAL	60
4.3.1	Ecuación diferencial estabilizada	60
4.3.2	Equivalencias con el esquema de difusión artificial	62
4.3.3	Equivalencia con la formulación de EF de Petrov-Galerkin	63
4.3.4	Equivalencia con el método de multiescalas	63
4.4	PROBLEMA MULTIDIMENSIONAL	64
4.4.1	Método de difusión artificial y expresión de Galerkin perturbada en problemas multidimensionales	64
4.5	MÉTODO DE CÁLCULO FINITESIMAL EN VARIAS DIMENSIONES	66
4.5.1	El papel de la difusión transversal estabilizadora	67
4.5.2	Cálculo de los parámetros de estabilización en el método de cálculo finitesimal	67
4.6	EJEMPLOS	70

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

4.6.1	Ejemplos de problemas de convección-conducción del calor 1D resueltos con el método de cálculo finitesimal	70
4.6.2	Problemas de convección-conducción bidimensionales resueltos con el método de cálculo finitesimal	73
4.6.3	Problema de convección-conducción del calor bidimensional con fuente nula y condición de contorno de Dirichlet no uniforme	76
4.7	ANÁLISIS TRANSITORIO DE PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN DEL CALOR	77
4.7.1	Discretización en el espacio y el tiempo	80
4.7.2	Método de Taylor-Galerkin	82
5	ANÁLISIS DE PROBLEMAS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR NO LINEALES	85
5.1	INTRODUCCIÓN	85
5.2	ANÁLISIS DE PROBLEMAS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR NO LINEALES ESTACIONARIOS	86
5.3	SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES NO LINEAL	88
5.3.1	Método de iteración directa	88
5.3.2	Método de Newton-Raphson	88
5.3.3	Cálculo de la matriz de rigidez tangente	90
5.4	VARIACIONES DEL MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON	91
5.5	PROBLEMA TRANSITORIO NO LINEAL	93
6	PROBLEMAS DE CAMBIO DE FASE	95
6.1	INTRODUCCIÓN	95
6.2	ANÁLISIS POR EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS	96
6.3	ANÁLISIS POR EL MEF DE PROBLEMAS DE CAMBIO DE FASE	97
6.3.1	Definición de entalpía	97
6.3.2	Formulación de elementos finitos	99
6.4	EJEMPLOS	101
6.4.1	Ejemplos de solidificación y fundición unidimensionales	101
7	PROBLEMAS TÉRMICOS ACOPLADOS	105
7.1	INTRODUCCIÓN	105
7.2	PROBLEMAS TERMO-MECÁNICOS UNIDIRECCIONALES	106
7.2.1	El problema térmico	106
7.2.2	El problema mecánico acoplado térmicamente	107
7.2.3	Discretización por el método de elementos finitos	110
7.2.4	Análisis del problema termo-mecánico unidireccional	112
7.3	PROBLEMAS TERMO-MECÁNICOS BIDIRECCIONALES	114
7.4	ACOPLAMIENTO TÉRMICO EN FLUIDOS	115
7.4.1	Ecuaciones de gobierno del problema acoplado	115

Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

7.5 Solución del problema acoplado por el método de elementos finitos 117

A CÁLCULO DE LAS INTEGRALES EN FORMA DISTRIBUIDA 119



Register for free at <https://www.scipedia.com> to download the version without the watermark

Capítulo 1

LA ECUACIÓN GENERAL DE TRANSMISIÓN DEL CALOR

1.1 INTRODUCCIÓN

Los problemas de transmisión del calor aparecen en numerosas aplicaciones en ingeniería civil, mecánica, química, eléctrica, aeronáutica, etc. [1-3]. La solución analítica de estos problemas es imposible, a excepción de algunos sencillos casos unidimensionales y bidimensionales de interés meramente académico. Es, por tanto, obligatorio acudir a herramientas numéricas para la solución de problemas de transmisión del calor de interés práctico.

En estas notas trataremos la solución numérica de la mayor parte de los problemas de transmisión del calor que pueden encontrarse en la práctica. Dichos problemas pueden agruparse en las categorías siguientes:

1. Problemas de transmisión de calor por conducción (difusión) en sólidos;
2. Problemas térmicos de convección-convección;
3. Problemas de cambio de fase, típicos en solidificación de metales y fundición de hielo;
4. Problemas acoplados en mecánica de sólidos y de fluidos.

Existe una gran variedad de métodos numéricos para resolver problemas de transmisión del calor [4-8]. Los métodos más populares en la actualidad son el método de diferencias finitas (DF) [4,5], el método de volúmenes finitos (MVF) [4,5] y el método de elementos finitos (MEF) [6,7,8]. El MDF tiene muchas ventajas, entre ellas, su simplicidad conceptual y su fácil implementación. En el MDF se divide primeramente el dominio de análisis en un conjunto de celdas, luego se satisfacen directamente las ecuaciones diferenciales del problema en cada uno de los puntos de vértice de las celdas, aproximando las derivadas por expresiones en diferencias, en función de valores de la temperatura en

cada vértice y los vértices que lo rodean [4,5]. El mayor inconveniente del MDF es que no es sencillo obtener esas expresiones en diferencias para formas irregulares de las celdas y tampoco es inmediato tratar las condiciones de contorno.

El MVF puede considerarse una extensión del MDF para tratar mallas irregulares [5, 9–12]. Las ecuaciones en el MVF se obtienen expresando el balance de flujos sobre dominios de control que cubren todo el dominio de análisis (por ejemplo, elementos triangulares o cuadriláteros). Dichas ecuaciones son formas integrales que relacionan los flujos de calor generados en el interior del dominio por fuentes de calor externas con los flujos convectivo y conductivo a través de los lados del volumen de control. Estos flujos se expresan a su vez en función de valores de la temperatura en puntos adyacentes a cada lado, utilizando expresiones en diferencias, o bien interpolaciones típicas del MEF [12]. En algunos casos particulares las ecuaciones resultantes del MVF son idénticas a las del MEF [9–12].

En estas notas nos centraremos en la solución de problemas de transmisión del calor por el MEF. La razón es la mayor generalidad y versatilidad del MEF para tratar todo tipo de problemas térmicos incluyendo problemas de convección-conducción, problemas no lineales y problemas acoplados en mecánica de sólidos y de fluidos.

1.2 ECUACIONES BÁSICAS DE LA TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONDUCCIÓN

1.2.1 Conceptos básicos sobre la transmisión del calor

Si una sustancia se calienta, su temperatura aumenta. El calor es, por tanto, una clase de energía que viaja de una región de alta temperatura a otra de temperatura más baja, de maneras diversas. Dichas formas de transmisión del calor son básicamente tres.

Si se expone al fuego un extremo de una barra de metal, se advierte que al cabo del tiempo el otro extremo de la barra también se calienta. Esta forma de transmisión del calor se denomina *conducción* (o difusión) y se produce por transmisión de energía de las moléculas más calientes a las moléculas adyacentes.

En un fluido, tal como un gas o un líquido, se propaga el calor por el movimiento de las partículas más calientes del fluido. Este efecto se denomina *convección* del calor. Así, el fluido en contacto con una fuente de calor se expande y se hace menos denso que el fluido más frío circundante, lo que provoca un movimiento ascendente del fluido más caliente. El fluido más frío se mueve para ocupar el hueco dejado por el fluido caliente, lo que provoca su contacto con la fuente y la repetición del fenómeno de calentamiento, expansión y ascenso. El calor se transfiere por el movimiento del fluido caliente en lo que se denomina una corriente convectiva.

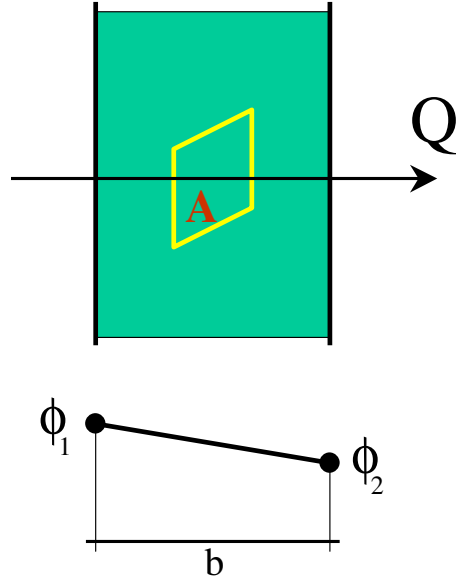


Figura 1.1: Conducción del calor a través de una pared

La tercera fuente de transmisión del calor es la *radiación*. Un ejemplo típico es la energía térmica que nos llega del sol. Por tanto, el calor es otra forma de la radiación electromagnética.

1.2.2 Conducción del calor

La ley de Fourier establece que la cantidad de calor Q que fluye por unidad de tiempo a través de un elemento de área A en una pared de espesor b , por diferencia de temperaturas entre los extremos de la pared ϕ_1 y ϕ_2 ($\phi_1 > \phi_2$) (Figura 1.1) es

$$Q = \frac{k}{b} A (\phi_1 - \phi_2) \quad (1.1)$$

donde k es la *conductividad térmica* que es una propiedad del material que constituye la pared. El valor de k se deduce de (1.1) por

$$k = \frac{Qb}{A(\phi_1 - \phi_2)} \quad (1.2)$$

y por tanto k se expresa en

$$\frac{\text{Joule}}{\text{s m}^\circ\text{C}} \quad (1.3)$$

La cantidad de calor que atraviesa una unidad de superficie por unidad de tiempo se denomina *flujo de calor*. Su expresión es

$$q = \frac{Q}{A} = \frac{k}{b} (\phi_1 - \phi_2) \quad (1.4)$$

La forma lineal discreta de la ec. (1.4) no existe en procesos transitorios y en general el flujo de calor varía localmente y en el tiempo. En la práctica se acepta que la ec. (1.4) se satisface en partes del cuerpo infinitesimales. Las expresiones diferenciales equivalentes de las ecs. (1.1) y (1.4) se escriben por

$$Q = -k dA \frac{\partial \phi}{\partial n} \quad (1.5)$$

$$q = -k \frac{\partial \phi}{\partial n} \quad (1.6)$$

donde n es la línea normal al plano del elemento diferencial de superficie dA a través del cual fluye el calor. El signo menos en las ecuaciones anteriores indica que el calor fluye en la dirección de la disminución de temperatura, es decir, en la dirección negativa del gradiente de temperatura $\partial \phi / \partial n$.

En un sólido descrito en un sistema de coordenadas cartesianas, se pueden escribir los flujos de calor en las direcciones x, y, z por

$$q_x = -k \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad q_y = -k \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad q_z = -k \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (1.7)$$

En forma matricial

$$\mathbf{q} = -k \nabla \phi \quad \text{con} \quad \mathbf{q} = \begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{Bmatrix} \quad \text{y} \quad \nabla = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (1.8)$$

Ley de Fourier en materiales no isótropos

La expresión (1.7) es válida sólo para materiales isótropos. En cuerpos como la madera, sustancias cristalinas y materiales fibrosos la conductividad es función de la dirección. La descripción más general de la conducción del calor en un material no isótropo establece que el flujo de calor depende de los gradientes de la temperatura en cada dirección. La ecuación (1.8) se reescribe en estos casos por

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D} \nabla \phi \quad (1.9)$$

con

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.10)$$

La matriz de conductividad \mathbf{D} puede expresarse en otro sistema de ejes x', y', z' por simple transformación tensorial como

$$\mathbf{D}' = \mathbf{T}^T \mathbf{D} \mathbf{T} \quad (1.11)$$

donde

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} C_{x'x} & C_{x'y} & C_{x'z} \\ C_{y'x} & C_{y'y} & C_{y'z} \\ C_{z'x} & C_{z'y} & C_{z'z} \end{bmatrix} \quad (1.12)$$

siendo $C_{x'x} = \cos(x', x)$ el coseno del ángulo formado por los ejes x' y x , etc.

Es interesante obtener los valores propios de la matriz \mathbf{D} . La matriz diagonal resultante se escribe como

$$\bar{\mathbf{D}}' = \begin{bmatrix} k_\xi & 0 & 0 \\ 0 & k_\eta & 0 \\ 0 & 0 & k_\zeta \end{bmatrix} \quad (1.13)$$

En (1.13) k_ξ , k_η y k_ζ son los coeficientes de conductividad principales correspondientes a las direcciones de conductividad principales ξ , η y ζ . Si estas direcciones son perpendiculares entre sí, el material se considera anisótropo ortogonal, como en el caso de la madera y materiales fibrosos.

Un caso de interés es cuando $k_{ij} = 0$ ($i \neq j$) y $k_{ii} = k_i$ en la ec. (1.10). Esto representa que los términos fuera de la diagonal son cero y los términos diagonales son diferentes en cada dirección cartesiana. El modelo isótropo es un caso particular de este último con $k_{ii} = k$. La expresión de la matriz \mathbf{D} en este último caso es

$$\mathbf{D}' = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

Ejemplo 1.1 *Obtener la matriz de conductividad en coordenadas cartesianas x, y para un material anisótropo con coeficientes de conductividad principales k_ξ y k_η , siendo ξ y η dos ejes ortogonales cartesianos*

Solución

La ecuación constitutiva en ejes de conductividad principales se escribe como

$$\mathbf{q}' = \begin{Bmatrix} q_\xi \\ q_\eta \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_\xi & 0 \\ 0 & k_\eta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \end{Bmatrix} = -\mathbf{D}' \nabla' \phi$$

La relación entre las coordenadas ξ, η y x, y es (ver Figura 1.2)

$$\mathbf{x} = \begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \xi \\ \eta \end{Bmatrix} = \mathbf{T} \mathbf{x}'$$

De la misma forma es fácil deducir que

$$\mathbf{q} = \begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \end{Bmatrix} = \mathbf{T}^T \mathbf{q}' \quad \text{y} \quad \nabla' \phi = \mathbf{T}^T \nabla \phi$$

De las ecuaciones anteriores se deduce

$$\mathbf{q} = \begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \end{Bmatrix} = -\mathbf{T} \mathbf{D}' \mathbf{T}^T \nabla \phi = -\mathbf{D} \nabla \phi$$

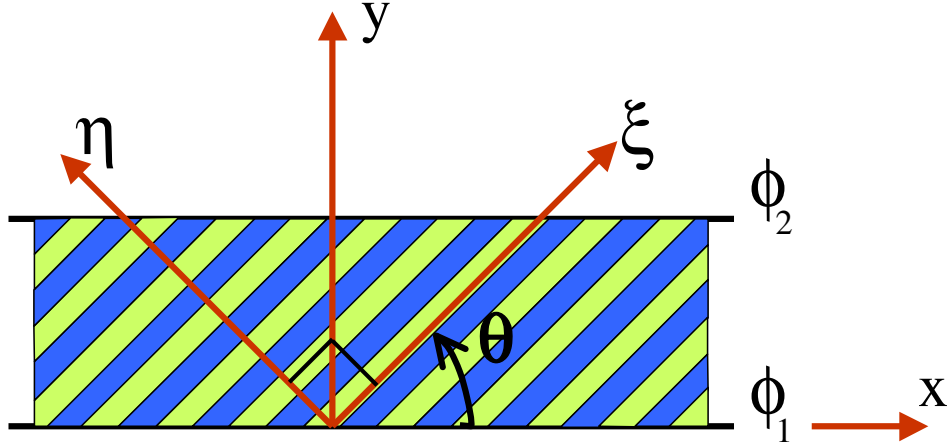


Figura 1.2: Material anisótropo en el plano

con

$$\mathbf{D} = \mathbf{T} \mathbf{D}' \mathbf{T}^T = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{yx} & k_{yy} \end{bmatrix}$$

con

$$\begin{aligned} k_{xx} &= k_{\xi} \cos^2 \theta + k_{\eta} \sin^2 \theta \\ k_{xy} &= k_{yx} = (k_{\xi} - k_{\eta}) \cos \theta \sin \theta \\ k_{yy} &= k_{\xi} \sin^2 \theta + k_{\eta} \cos^2 \theta \end{aligned}$$

Obsérvese que si $k_{\xi} = k_{\eta} = k$ el material es isótropo, cumpliéndose que $k_{xy} = k_{yx} = 0$ y $k_{xx} = k_{yy} = k(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = k$

EL EFECTO DE LA CONVECCIÓN

La convección del calor se produce cuando un grupo de moléculas se mueve desde un lugar a una cierta temperatura a otro con una temperatura diferente. Imaginemos un grupo de partículas que se mueven a una velocidad fija con componentes $\mathbf{u} = [u, v, w]^T$. El flujo de calor que cruza un plano cualquiera debido a la convección viene dado por $\rho c \phi \mathbf{u}$, siendo ρ la densidad del sólido (en kg/m^3) y c su calor específico (en $\text{J/kg } ^\circ\text{C}$). Dicho flujo debe añadirse a la parte debida a la conducción. Así, el vector de flujo se expresa por

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D} \nabla \phi + \rho c \phi \mathbf{u} \quad (1.15)$$

En componentes

$$\begin{aligned} q_x &= -k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho c u \phi \\ q_y &= -k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \rho c v \phi \\ q_z &= -k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + \rho c w \phi \end{aligned} \quad (1.16)$$

El campo de velocidades \mathbf{u} viene dado por la solución del correspondiente problema de dinámica de fluidos. En la mayor parte del texto supondremos que \mathbf{u} es conocido y corresponde a un fluido incompresible en el que la divergencia del campo de velocidades es nula (es decir $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = \nabla^T \mathbf{u} = 0$). En el Capítulo 7 estudiaremos el problema completo de acoplamiento de las ecuaciones de convección-difusión con las del fluido.

1.3 OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE BALANCE TÉRMICO

Consideremos el dominio bidimensional de la Figura 1.3. El equilibrio de flujos de calor se escribe por

$$\underbrace{q_x dy + q_y dx + Q dx dy}_{\text{calor entrante}} - \underbrace{\left(q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \right) dy - \left(q_y + \frac{\partial q_y}{\partial y} dy \right) dx}_{\text{calor saliente}} = \underbrace{\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dy}_{\text{calor acumulado}} \quad (1.17)$$

Simplificando se obtiene

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + Q \quad (1.18)$$

Sustituyendo los valores de q_x y q_y de la ec. (1.15) se llega a

$$\rho c \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + Q \quad (1.19)$$

La expresión anterior se denomina *la ecuación de convección-difusión del calor transitoria* para el caso bidimensional. La generalización de dicha expresión a 1,2 y 3 dimensiones se escribe como

$$\boxed{\rho c \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}^T \nabla \phi \right) = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q} \quad (1.20)$$

Donde, por ejemplo, en 3D $\mathbf{u} = [u, v, w]^T$, $\nabla = [\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y}, \frac{\partial \phi}{\partial z}]^T$ y \mathbf{D} es la matriz constitutiva dada por la ec. (1.10) para el caso anisótropo más general o por la expresión (1.14) para el más sencillo caso isótropo.

Obsérvese que la *ecuación de transmisión del calor por conducción transitoria* es un caso particular de la ec. (1.20), haciendo $\mathbf{u} = 0$, obtenemos

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q \quad (1.21)$$

Otro caso de interés es la expresión estacionaria de la ec. (1.20). Las dos soluciones prácticas más usuales son

Ecuación de convección-conducción estacionaria

$$-\rho c \mathbf{u}^T \nabla \phi + \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad (1.22)$$

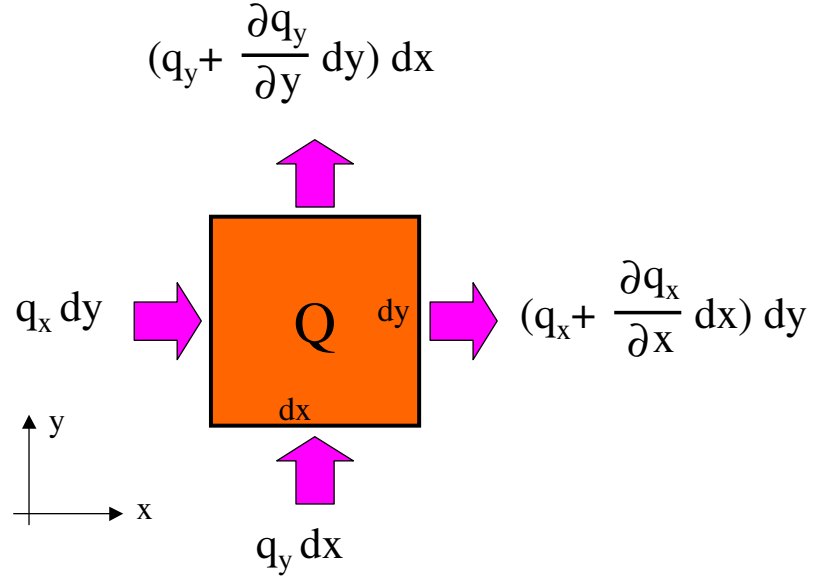


Figura 1.3: Equilibrio de flujos de calor en un dominio bidimensional

Ecuación de conducción del calor estacionaria

$$\nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad (1.23)$$

1.4 CONDICIONES DE CONTORNO INICIALES

Existen típicamente dos condiciones de contorno. En la primera condición se definen los valores de la temperatura en el contorno Γ (condición de Dirichlet o esencial). Estos valores pueden ser constantes o pueden variar en el tiempo, es decir

$$\phi = \bar{\phi}(x, y, z, t) \quad \text{sobre} \quad \Gamma_{\phi} \quad (1.24)$$

En la segunda condición de contorno el flujo de calor que sale en la dirección normal al contorno Γ_q está prescrito (condición de Neumann). Esta condición se expresa por

$$q_n = \bar{q}_n(x, y, z, t) \quad (1.25)$$

donde q_n es el flujo normal al contorno y \bar{q}_n el valor prescrito del flujo. El flujo q_n se calcula proyectando sobre la norma al contorno \mathbf{n} el vector de flujo \mathbf{q} . Así, utilizando la ec. (1.15)

$$q_n = \mathbf{n}^T \mathbf{q} = \mathbf{n}^T (-\mathbf{D} \nabla \phi + \rho c \phi \mathbf{u}) = -\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \rho c \phi u_n \quad (1.26)$$

donde $u_n = \mathbf{n}^T \mathbf{u}$ es la velocidad normal al contorno Γ_q . Combinando (1.26) y (1.25) se tiene

$$-\rho c \phi u_n + \mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q}_n = 0 \quad (1.27)$$

El término \bar{q}_n puede deberse a varios efectos. En primer lugar puede conocerse simplemente el valor del flujo de calor normal al contorno por efectos convectivos y difusivos. Así

$$\bar{q}_n = \bar{q} \quad (1.28)$$

Por otro lado, en muchos casos existe un flujo de calor convectivo entre los contornos de un sólido y un fluido (p.e. el aire). En estas situaciones se considera la convección como una nueva condición de contorno en el dominio sólido.

Newton observó que la transmisión de calor por efectos convectivos entre el contorno de un sólido y un fluido circundante, es función de la diferencia de temperaturas entre el sólido y el fluido. Así, puede escribirse

$$q_n = \alpha(\phi - \phi_{\text{ext}}) \quad (1.29)$$

donde ϕ es la temperatura del contorno del sólido y ϕ_{ext} la del fluido (generalmente el aire) que le rodea. El coeficiente α se denomina coeficiente de convección entre el sólido y el fluido.

Un último efecto de pérdida de calor a través del contorno se debe a *la radiación térmica*. Se admite que el flujo de calor por radiación térmica entre un contorno de un sólido a una temperatura ϕ y el volumen exterior de fluido (aire) que le rodea a una temperatura ϕ_{ext} viene dado por

$$q_n = \varepsilon\sigma(\phi^4 - \phi_{\text{ext}}^4) \quad (1.30)$$

donde σ es la constante de proporcionalidad de Stefan-Boltzmann con un valor de $5669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ y ε es la emisividad del sólido ($0 < \varepsilon \leq 1$). Combinando las ecs. (1.28), (1.29) y (1.30) con la ec. (1.27) se obtiene la condición de contorno de Neumann completa

$$-\rho c u_n + \mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} + \alpha(\phi - \phi_{\text{ext}}) + \varepsilon\sigma(\phi^4 - \phi_{\text{ext}}^4) = 0 \quad (1.31)$$

Obsérvese que el término de radiación introduce una alta no linealidad en la condición de contorno. Una forma de simplificar este problema es linealizar ese término, incorporando su efecto dentro del término del flujo de calor prescrito constante \bar{q} .

El planteamiento del problema transitorio se completa con la definición del valor inicial de la temperatura por

$$\phi(x, y, z, 0) = \phi_0(x, y, z) \quad \text{en } \Omega \quad (1.32)$$

Notas

1. En un problema meramente conductivo el término $-\rho c \phi u_n$ no interviene en la ec. (1.31).
2. En un problema estacionario no es necesaria la condición (1.32).

Capítulo 2

CONDUCCIÓN DEL CALOR ESTACIONARIA

2.1 INTRODUCCIÓN

La transmisión de calor por conducción pura es un problema característico de propagación del calor en sólidos. El interés de conocer la distribución de temperaturas en un sólido es muchas veces el paso previo a un análisis tenso-deformacional, tomando las deformaciones debidas al incremento de temperatura en los puntos del sólido como deformaciones iniciales. El estudio del problema termo-mecánico acoplado se trata en el Capítulo 7.

En este capítulo nos concentraremos en el análisis por el MEF del problema de conducción del calor en régimen estacionario. El caso transitorio se trata en el Capítulo 3.

2.2 ECUACIONES BÁSICAS

La ecuación de balance de flujos en la transmisión del calor por conducción estacionaria es un caso particular de la ec. (1.20) prescindiendo de los términos transitorios y de convección. La expresión general se escribe por tanto

$$\nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (2.1)$$

con las condiciones de contorno

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en } \Gamma_\phi \quad (2.2)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} + \alpha(\phi - \phi_{\text{ext}}) = 0 \quad \text{en } \Gamma_q \quad (2.3)$$

La condición de flujo prescrito en el contorno (2.3) (condición de Neumann) se ha obtenido de la más general (1.31) prescindiendo del término convectivo $-\rho c u_n$. Para mayor sencillez se ha prescindido también de los efectos de radiación térmica (término $\varepsilon \sigma(\phi^4 - \phi_{\text{ext}}^4)$ en (1.31)).

Las ecuaciones (2.1)–(2.3) están escritas en forma genérica para el problema uni, bi y tridimensional. En lo sucesivo se mantendrá esta notación compacta, particulándose las expresiones resultantes de las matrices y vectores en la formulación del MEF para cada caso.

2.3 FORMULACIÓN DE ELEMENTOS FINITOS

Consideremos una discretización del dominio Ω por elementos finitos (Figura 2.1). La aproximación de la temperatura ϕ en el interior de cada elemento se escribe como [6,12]

$$\phi \cong \hat{\phi} = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} \phi_i^{(e)} \quad (2.4)$$

donde $\hat{\phi}$ es el valor aproximado de la temperatura, $\phi_i^{(e)}$ es el valor de $\hat{\phi}$ en el nodo i , $N_i^{(e)}$ es la función de forma de dicho nodo (en 2D $N_i = N_i(x, y)$) y n es el número de nodos del elemento. Para el elemento triangular lineal de la Figura 2.2, $n = 3$ y

$$N_i^{(e)} = \frac{1}{2\Omega^{(e)}} (a_i^{(e)} + b_i^{(e)}x + c_i^{(e)}y) \quad (2.5)$$

con

$$\begin{aligned} a_i^{(e)} &= x_j^{(e)}y_k^{(e)} - x_k^{(e)}y_j^{(e)} \\ b_i^{(e)} &= x_j^{(e)} - x_k^{(e)} \\ c_i^{(e)} &= y_k^{(e)} - y_j^{(e)} \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2.6)$$

siendo $\Omega^{(e)}$ el área del elemento y $x_i^{(e)}, y_i^{(e)}$ las coordenadas del nodo i .

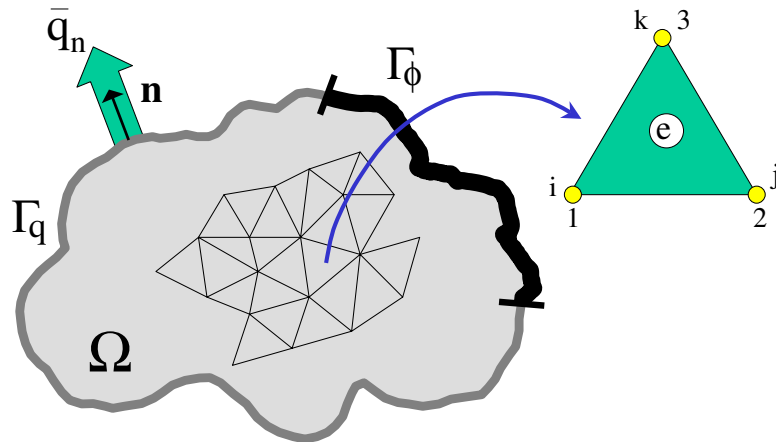


Figura 2.1: Discretización del dominio en elementos triangulares de tres nodos

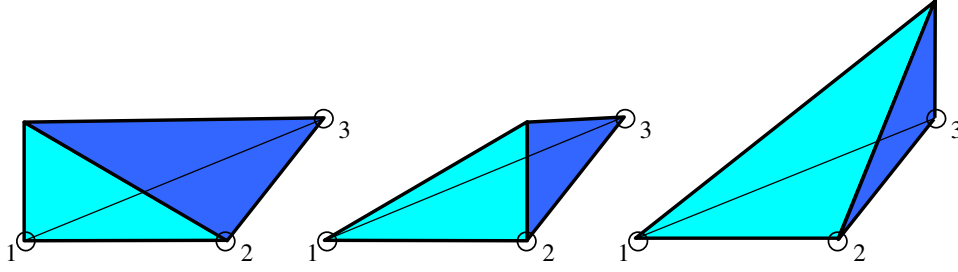


Figura 2.2: Funciones de forma del elemento de tres nodos

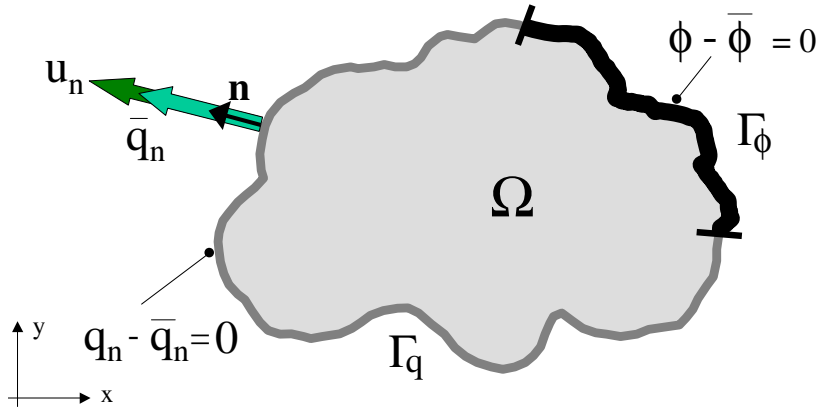


Figura 2.3: Condiciones sobre los contornos Γ_q y Γ_ϕ

Puede comprobarse que $N_i^{(e)}$ vale uno en el nodo i y cero en los otros nodos del elemento.

Sustituyendo la aproximación (2.4) en las ecs. (2.1) y (2.3) se obtiene (Figura 2.3)

$$\nabla \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + Q = r_\Omega \quad \text{en} \quad \Omega \quad (2.7)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + \bar{q} + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}}) = r_\Gamma \quad \text{en} \quad \Gamma_q \quad (2.8)$$

En lo anterior r_Ω y r_Γ son los *residuos* o errores de la aproximación en las ecuaciones de balance de calor sobre el dominio Ω y en el contorno de Neumann Γ_q respectivamente. Obviamente, cuanto menores sean estos residuos mejor será la aproximación de ϕ . En lo que respecta a la condición esencial (2.8) supondremos en lo sucesivo que se satisface *exactamente*, prescribiendo los valores de ϕ al valor $\bar{\phi}$ en los nodos del contorno de Dirichlet Γ_ϕ .

2.3.1 Expresión de residuos ponderados de Galerkin

El método de residuos ponderados se basa en hacer nulos los residuos r_Ω y r_Γ sobre Ω y Γ_q , respectivamente, de forma ponderada. La expresión integral resultante es

$$\int_{\Omega} W_i r_\Omega d\Omega + \int_{\Gamma_q} \bar{W}_i r_\Gamma d\Gamma = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.9)$$

donde W_i y \bar{W}_i son funciones de peso arbitrarias, que dependen de la posición y N el número total de nodos en la malla de análisis. Sustituyendo las expresiones (2.7) y (2.8) en (2.9) se tiene

$$\int_{\Omega} W_i (\nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + Q) d\Omega + \int_{\Gamma_q} \bar{W}_i [\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + \bar{q} + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}})] d\Gamma = 0 \quad (2.10)$$

Las integrales anteriores hay que considerarlas siempre en un *sentido distribucional*, ya que el gradiente $\nabla \hat{\phi}$ es usualmente discontinuo entre elementos. El primer término de la integral sobre el dominio Ω puede expresarse por

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} W_i \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega &= \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} W_i \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \sum_e \int_{\Gamma^{(e)}} W_i \mathbf{n}^T \mathbf{D} \llbracket \nabla \hat{\phi} \rrbracket d\Gamma = \\ &= - \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T W_i \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma} W_i \mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Gamma \end{aligned} \quad (2.11)$$

En (2.11) $\Gamma^{(e)}$ es el contorno de cada elemento de área $\Omega^{(e)}$ individual y $\llbracket \nabla \hat{\phi} \rrbracket$ el salto del gradiente de la aproximación $\hat{\phi}$ sobre los lados del contorno. El sumatorio en (2.11) se extiende sobre todos los elementos de la malla. La demostración de la expresión (2.11) se presenta en el Anexo 1.

La expresión (2.11) es idéntica a la que se obtendría integrando por partes el término en derivadas segundas de $\hat{\phi}$ en (2.10) y expresando la integral sobre el dominio como suma de las integrales sobre cada uno de los elementos.

Sustituyendo (2.11) en (2.10) y advirtiendo que $\Gamma = \Gamma_\phi + \Gamma_q$ se tiene

$$\begin{aligned} & - \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T W_i \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_\phi + \Gamma_q} W_i \mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Gamma + \int_{\Omega} W_i Q d\Omega + \\ & + \int_{\Gamma_q} \bar{W}_i [\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + \bar{q} + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}})] d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Escogiendo ahora $\bar{W} = -W_i$ y $W = N_i$ se llega finalmente a

$$\begin{aligned} & - \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T W_i \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Omega} W_i Q d\Omega - \\ & - \int_{\Gamma_q} W_i [\bar{q} + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}})] d\Gamma - \int_{\Gamma_\phi} W_i \bar{q}_n d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde \hat{q}_n es el flujo normal (saliente) en el contorno Γ_ϕ donde la temperatura está prescrita. Este flujo se calcula “a posteriori” una vez obtenidos los valores de $\hat{\phi}$ en todo el dominio.

Es instructivo agrupar los términos dependientes de $\hat{\phi}$ en el primer miembro. La expresión resultante es

$$\sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T W_i \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_q} \alpha W_i \hat{\phi} d\Omega = \int_{\Omega} W_i Q d\Omega - \int_{\Gamma_q} W_i (\bar{q} - \alpha \phi_{\text{ext}}) d\Gamma - \int_{\Gamma_\phi} W_i q_n d\Gamma \quad (2.14)$$

La forma integral de Galerkin se obtiene haciendo $W_i^{(e)} = N_i^{(e)}$. Es decir, escogiendo las funciones de peso igual a las funciones de forma en el interior de cada elemento.

Sustituyendo la aproximación (2.4) en (2.14) se obtiene el sistema de ecuaciones algebraicas de la discretización que se expresa por

$$\mathbf{K} \mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (2.15)$$

donde

$$\mathbf{a} = [\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \dots, \hat{\phi}_N]^T \quad (2.16)$$

es el vector de temperaturas nodales, \mathbf{K} la matriz de rigidez y \mathbf{f} el vector de flujos nodales equivalentes. Las expresiones de \mathbf{K} y \mathbf{f} se obtienen por ensamblaje de la contribución de cada uno de los elementos. En forma general puede escribirse

$$\mathbf{K} = \mathbb{E} \mathbf{K}^{(e)} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{f}^{(e)} = \mathbb{E} \mathbf{f}^{(e)} \quad (2.18)$$

donde \mathbb{E} es el operador de ensamblaje y $\mathbf{K}^{(e)}$ y $\mathbf{f}^{(e)}$ la matriz de rigidez y el vector de flujos nodales equivalentes elementales dados por

$$\mathbf{K}^{(e)} = \begin{bmatrix} K_{11}^{(e)} & \dots & K_{1n}^{(e)} \\ \vdots & & \vdots \\ \text{sim.} & & K_{nn}^{(e)} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{f}^{(e)} = [f_1^{(e)}, f_2^{(e)}, \dots, f_n^{(e)}]^T \quad (2.20)$$

con

$$K_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T N_i^{(e)} \mathbf{D} \nabla N_j^{(e)} d\Omega + \int_{\Gamma_q^{(e)}} \alpha N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Gamma \quad (2.21)$$

$$f_i^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} Q d\Omega - \int_{\Gamma_q^{(e)}} N_i^{(e)} (\bar{q} + \alpha \phi_{\text{ext}}) d\Gamma - q_{n_i}^{(e)} \quad (2.22)$$

En (2.22) $q_{n_i}^{(e)} = \int_{\Gamma_\phi} N_i \hat{q}_n d\Gamma$. Este término representa la contribución elemental al flujo normal que sale por el nodo i en el contorno Γ_ϕ . Como se ha comentado anteriormente, este flujo en la práctica se calcula "a posteriori" una vez calculados los valores de $\hat{\phi}$ en todo el dominio.

Se destaca que tanto el término $q_{n_i}^{(e)}$ como las integrales sobre $\Gamma_q^{(e)}$ en (2.21) y (2.22) sólo aparecen en elementos que *tengan algún lado* sobre los contornos de Dirichlet o de Neumann, respectivamente.

2.4 EXPRESIONES DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$ PARA EL TRIÁNGULO LINEAL

2.4.1 Matriz de rigidez $\mathbf{K}^{(e)}$

Para un elemento triangular lineal la expresión de $\mathbf{K}^{(e)}$ se obtiene por

$$\mathbf{K}^{(e)} = \mathbf{K}_k^{(e)} + \mathbf{K}_c^{(e)} \quad (2.23)$$

donde $\mathbf{K}_k^{(e)}$ y $\mathbf{K}_c^{(e)}$ son las contribuciones debidas a los términos de conducción y convección, respectivamente (primera y segunda integral en la ec. (2.21)). La expresión de dichas matrices es

$$\mathbf{K}_{k_{ij}} = \frac{1}{4\Omega^{(e)}} [b_i^{(e)}, c_i^{(e)}] \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{xy} & k_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_j^{(e)} \\ c_j^{(e)} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Para un material isótropo $k_{xx} = k_{yy} = k$ y $k_{xy} = 0$.

La expresión de $\mathbf{K}_c^{(e)}$ es

$$\mathbf{K}_c^{(e)} = \alpha \int_{\Gamma_q^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} N_1^{(e)} & N_1^{(e)} N_2^{(e)} & N_1^{(e)} N_3^{(e)} \\ N_2^{(e)} N_1^{(e)} & N_2^{(e)} N_2^{(e)} & N_2^{(e)} N_3^{(e)} \\ N_3^{(e)} N_1^{(e)} & N_3^{(e)} N_2^{(e)} & N_3^{(e)} N_3^{(e)} \end{bmatrix} d\Gamma \quad (2.25)$$

Es importante advertir que al realizar la integral anterior sobre un lado del elemento, la función de forma del tercer nodo que no pertenece al lado forma un valor nulo sobre el mismo. Ello permite simplificar la expresión (2.25) de acuerdo con el lado donde se calcula la integral de contorno.

Así, para el lado 12, $N_3^{(e)} = 0$ y

$$K_{c_{12}}^{(e)} = \int_{l_{12}^{(e)}} \alpha \begin{bmatrix} N_1^{(e)} N_1^{(e)} & N_1^{(e)} N_2^{(e)} & 0 \\ N_2^{(e)} N_1^{(e)} & N_2^{(e)} N_2^{(e)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} d\Gamma \quad (2.26)$$

Para el lado 23

$$K_{c_{2-3}}^{(e)} = \int_{l_{23}^{(e)}} \alpha \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & N_2^{(e)} N_2^{(e)} & N_2^{(e)} N_3^{(e)} \\ 0 & N_3^{(e)} N_2^{(e)} & N_3^{(e)} N_3^{(e)} \end{bmatrix} d\Gamma \quad (2.27)$$

Para el lado 13

$$K_{c_{13}}^{(e)} = \int_{l_{13}^{(e)}} \alpha \begin{bmatrix} N_1^{(e)} N_1^{(e)} & 0 & N_1^{(e)} N_3^{(e)} \\ 0 & 0 & 0 \\ N_1^{(e)} N_3^{(e)} & 0 & N_3^{(e)} N_3^{(e)} \end{bmatrix} d\Gamma \quad (2.28)$$

Suponiendo que α es constante sobre el lado es fácil integrar los términos anteriores, lo que proporciona

$$\int_{l_{ij}^{(e)}} N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Gamma = \begin{cases} l_{ij}^{(e)}/3; & i = j \\ l_{ij}^{(e)}/6; & i \neq j \end{cases} \quad (2.29)$$

siendo $l_{ij}^{(e)}$ la longitud del lado $i - j$ del elemento (e) .

En función de ello, se tendrá

$$K_{c_{12}}^{(e)} = \frac{\alpha l_{12}^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad K_{c_{23}}^{(e)} = \frac{\alpha l_{23}^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}; \quad K_{c_{13}}^{(e)} = \frac{\alpha l_{13}^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Por lo tanto, en definitiva, la matriz de rigidez total del elemento se obtiene por

$$\mathbf{K}^{(e)} = \mathbf{K}_k^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{12}}^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{23}}^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{13}}^{(e)} \quad (2.31)$$

Vector de flujos equivalentes nodales

La expresión genérica de $\mathbf{f}^{(e)}$ para el triángulo de tres nodos es

$$\mathbf{f}^{(e)} = \begin{Bmatrix} f_1^{(e)} \\ f_2^{(e)} \\ f_3^{(e)} \end{Bmatrix} \quad (2.32)$$

Obtengamos seguidamente las contribuciones de los términos de fuente y de convección de $\mathbf{f}^{(e)}$.

Observando (2.22), se tiene de la primera integral que

$$\mathbf{f}_Q^{(e)} = \begin{Bmatrix} f_{Q1}^{(e)} \\ f_{Q2}^{(e)} \\ f_{Q3}^{(e)} \end{Bmatrix} = \iint_{\Omega^{(e)}} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ N_2^{(e)} \\ N_3^{(e)} \end{Bmatrix} Q d\Omega \quad (2.33)$$

Suponiendo un valor constante de Q sobre el elemento se obtiene

$$\mathbf{f}_Q^{(e)} = \frac{QA^{(e)}}{3} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

La contribución del término de convección al vector de flujos nodales se calcula como sigue

$$\mathbf{f}_c^{(e)} = - \int_{\Gamma_q} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ N_2^{(e)} \\ N_3^{(e)} \end{Bmatrix} [\bar{q}_n - \alpha \phi_{ext}] d\Gamma \quad (2.34)$$

Como en el cálculo de la matriz de rigidez, en la evaluación de la integral anterior hay que tener en cuenta que sobre cada lado sólo son diferentes de cero las funciones de forma correspondientes a dicho lado. Así, el valor de $\mathbf{f}_c^{(e)}$ se obtiene para cada lado por:

lado 12

$$\mathbf{f}_{c12}^{(e)} = - \int_{l_{12}^{(e)}} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ N_2^{(e)} \\ 0 \end{Bmatrix} [\bar{q}_n - \alpha \phi_{ext}] d\Gamma \quad (2.35)$$

lado 13

$$\mathbf{f}_{c13}^{(e)} = - \int_{l_{13}^{(e)}} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ 0 \\ N_3^{(e)} \end{Bmatrix} [\bar{q}_n - \alpha \phi_{ext}] d\Gamma \quad (2.36)$$

lado 22

$$\mathbf{f}_{c23}^{(e)} = - \int_{l_{23}^{(e)}} \begin{Bmatrix} 0 \\ N_2^{(e)} \\ N_3^{(e)} \end{Bmatrix} [\bar{q}_n - \alpha \phi_{ext}] d\Gamma \quad (2.37)$$

Suponiendo ahora que \bar{q}_n , α y ϕ_{ext} son constantes sobre el lado se obtiene

$$\mathbf{f}_{c12}^{(e)} = \frac{l_{12}^{(e)}}{2} [\bar{q}_n - \alpha \phi_{ext}] \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Con expresiones similares para $\mathbf{f}_{c13}^{(e)}$ y $\mathbf{f}_{c23}^{(e)}$.

Al vector de flujos nodales hay que añadir la contribución de los flujos reacción en los contornos Γ_ϕ donde ϕ está prescrito. Dichos flujos se añaden directamente a los nodos del contorno correspondiente y su valor se obtiene a posteriori una vez calculados los valores nodales de ϕ .

2.5 EXPRESIÓN DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$ PARA EL TETRAEDRO LINEAL

2.5.1 MATRIZ $\mathbf{K}^{(e)}$

Las expresiones de $\mathbf{K}_k^{(e)}$ Y $\mathbf{K}_c^{(e)}$ para el tetraedro de cuatro nodos (Figura 2.5) son las siguientes

$$K_{k_{ij}}^{(e)} = \frac{1}{36\Omega^{(e)}} [b_i^{(e)}, c_i^{(e)}, d_i^{(e)}] \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ & k_{yy} & k_{yz} \\ \text{sim} & & k_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_j^{(e)} \\ c_j^{(e)} \\ d_j^{(e)} \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

con

$$a_i^{(e)} = \begin{vmatrix} x_j^{(e)} & y_j^{(e)} & z_j^{(e)} \\ x_k^{(e)} & y_k^{(e)} & z_k^{(e)} \\ x_l^{(e)} & y_l^{(e)} & z_l^{(e)} \end{vmatrix}; \quad b_i^{(e)} = - \begin{vmatrix} 1 & y_j^{(e)} & z_j^{(e)} \\ 1 & y_k^{(e)} & z_k^{(e)} \\ 1 & y_l^{(e)} & z_l^{(e)} \end{vmatrix} \quad (2.39)$$

$$c_i^{(e)} = \begin{vmatrix} x_j^{(e)} & 1 & z_j^{(e)} \\ x_k^{(e)} & 1 & z_k^{(e)} \\ x_l^{(e)} & 1 & z_l^{(e)} \end{vmatrix}; \quad d_i^{(e)} = - \begin{vmatrix} x_j^{(e)} & y_j^{(e)} & 1 \\ x_k^{(e)} & y_k^{(e)} & 1 \\ x_l^{(e)} & y_l^{(e)} & 1 \end{vmatrix} \quad (2.40)$$

el resto de las constantes se obtiene rotando cíclicamente los subíndices (i, j, k, l) aplicando la regla de la mano derecha.

El volumen del elemento $\Omega^{(e)}$ se halla a partir del determinante

$$6\Omega^{(e)} = \begin{vmatrix} 1 & x_i^{(e)} & y_i^{(e)} & z_i^{(e)} \\ 1 & x_j^{(e)} & y_j^{(e)} & z_j^{(e)} \\ 1 & x_k^{(e)} & y_k^{(e)} & z_k^{(e)} \\ 1 & x_l^{(e)} & y_l^{(e)} & z_l^{(e)} \end{vmatrix} \quad (2.41)$$

Para un material isótropo $k_{xx} = k_{yy} = k_{zz} = k$ y $k_{xy} = k_{xz} = k_{yz} = 0$.

La forma general de la matriz de rigidez del elemento asociada a la condición de contorno de convección está dada por

$$\mathbf{K}_c^{(e)} = \iint_{\Gamma_q^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} N_1^{(e)} & \dots & N_1^{(e)} N_4^{(e)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ N_4^{(e)} N_1^{(e)} & \dots & N_4^{(e)} N_4^{(e)} \end{bmatrix} \alpha d\Gamma \quad (2.42)$$

Los contornos del tetraedro son las caras del mismo (Figura 2.5). Por ello, las funciones de forma $N_i^{(e)}$ serán nulas, si el nodo i no pertenece a la cara sobre la que se calcule la integral. De la expresión de las funciones de forma es relativamente fácil obtener

$$K_{c_{ij}}^{(e)} = \iint_{\Gamma_q^{(e)}} \alpha N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Gamma = \begin{cases} \frac{\alpha A^{(e)}}{6}; & i = j \\ \frac{\alpha A^{(e)}}{12}; & i \neq j \end{cases} \quad (2.43)$$

siendo $A^{(e)}$ el área de la cara del tetraedro donde se prescribe una condición de contorno de convección.

Así, sobre la cara 124 del tetraedro de la figura señalada, $N_3^{(e)} = 0$ y

$$\mathbf{K}_{c_{124}}^{(e)} = \iint_{\Gamma_{q_{124}}^{(e)}} \alpha \begin{bmatrix} N_1^{(e)} N_1^{(e)} & N_1^{(e)} N_2^{(e)} & 0 & N_1^{(e)} N_4^{(e)} \\ N_2^{(e)} N_1^{(e)} & N_2^{(e)} N_2^{(e)} & 0 & N_2^{(e)} N_4^{(e)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ N_4^{(e)} N_1^{(e)} & N_4^{(e)} N_2^{(e)} & 0 & N_4^{(e)} N_4^{(e)} \end{bmatrix} d\Gamma \quad (2.44)$$

Si α es constante sobre la cara 124

$$\mathbf{K}_{c_{124}}^{(e)} = \frac{\alpha A_{124}^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

El mismo procedimiento se sigue para calcular $\mathbf{K}_c^{(e)}$ sobre las otras caras del tetraedro.

En conclusión, la matriz de rigidez del elemento se desglosa en

$$\mathbf{K}^{(e)} = \mathbf{K}_c^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{123}}^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{124}}^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{134}}^{(e)} + \mathbf{K}_{c_{234}}^{(e)} \quad (2.46)$$

2.5.2 Vector de flujos nodales equivalentes

$$\mathbf{f}_Q^{(e)} = \begin{Bmatrix} f_{Q_1}^{(e)} \\ f_{Q_2}^{(e)} \\ f_{Q_3}^{(e)} \\ f_{Q_4}^{(e)} \end{Bmatrix} = \iiint_{\Omega} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ N_2^{(e)} \\ N_3^{(e)} \\ N_4^{(e)} \end{Bmatrix} Q d\Omega \quad (2.47)$$

Si Q es constante sobre el elemento se obtiene

$$\mathbf{f}_Q^{(e)} = \frac{Q\Omega^{(e)}}{4} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (2.48)$$

Se comprueba que la aportación de flujo total sobre el elemento se distribuye en partes iguales entre los nodos, tal y como ocurría en el triángulo de tres nodos.

El vector asociado a los nodos sobre la cara ijl donde se prescribe el flujo normal, será

$$\mathbf{f}_{c_{ijl}}^{(e)} = - \iint_{\Gamma_{q_{ijl}}^{(e)}} (\bar{q} - \alpha\phi_{\text{ext}}) \begin{Bmatrix} N_i^{(e)} \\ N_j^{(e)} \\ N_k^{(e)} \\ N_l^{(e)} \end{Bmatrix} d\Gamma = - \iint_{A_{ijl}^{(e)}} (\bar{q} - \alpha\phi_{\text{ext}}) \begin{Bmatrix} N_i^{(e)} \\ N_j^{(e)} \\ 0 \\ N_l^{(e)} \end{Bmatrix} d\Gamma \quad (2.49)$$

siendo $A_{ijl}^{(e)}$ el área de la cara ijl donde $N_k^{(e)} = 0$. Si \bar{q} , α y ϕ_{ext} son constantes sobre dicha cara, se deduce

$$\mathbf{f}_{c_{ijl}}^{(e)} = -\frac{A_{ijl}^{(e)}}{3} (\bar{q} - \alpha\phi_{\text{ext}}) \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (2.50)$$

De forma similar se obtendría el valor de $\mathbf{f}_c^{(e)}$ para otras caras donde se prescriba el flujo normal.

En resumen, el vector de flujos nodales del elemento $\mathbf{f}^{(e)}$ se desglosa en

$$\mathbf{f}^{(e)} = \mathbf{f}_Q^{(e)} + \mathbf{f}_{c_{123}}^{(e)} + \mathbf{f}_{c_{124}}^{(e)} + \mathbf{f}_{c_{134}}^{(e)} + \mathbf{f}_{c_{234}}^{(e)} \quad (2.51)$$

siendo

$$\mathbf{f}_{234} = -\frac{A_{234}^{(e)}}{3}(\bar{q} - \alpha\phi_{\text{ext}}) \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad \text{etc.} \quad (2.52)$$

2.6 FORMA MATRICIAL DE LAS ECUACIONES DE MEF

La aproximación de elementos finitos se escribe matricialmente para un elemento de n nodos por

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} \phi_i^{(e)} = [N_1^{(e)}, N_2^{(e)}, \dots, N_n^{(e)}] \begin{Bmatrix} \phi_1^{(e)} \\ \phi_2^{(e)} \\ \vdots \\ \phi_n^{(e)} \end{Bmatrix} = \mathbf{N}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)} \quad (2.53)$$

con

$$\begin{aligned} \mathbf{N}^{(e)} &= [N_1^{(e)}, N_2^{(e)}, \dots, N_n^{(e)}] \\ \mathbf{a}^{(e)} &= [\phi_1^{(e)}, \phi_2^{(e)}, \dots, \phi_n^{(e)}]^T \end{aligned} \quad (2.54)$$

La matriz $\mathbf{N}^{(e)}$ recibe el nombre de *matriz de funciones de forma* del elemento y $\mathbf{a}^{(e)}$ es el *vector de variables nodales* del elemento.

El vector de gradientes se expresa en función de las variables nodales elementales por

$$\mathbf{g} = \nabla \phi = \nabla(\mathbf{N}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)}) = [\nabla \mathbf{N}^{(e)}] \mathbf{a}^{(e)} = \mathbf{B}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)} \quad (2.55)$$

donde $\mathbf{B}^{(e)}$ es la *matriz de gradientes* del elemento definida por

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{(e)} &= \nabla \mathbf{N}^{(e)} = \nabla [N_1^{(e)}, N_2^{(e)}, \dots, N_n^{(e)}] = \\ &= [\nabla N_1^{(e)}, \nabla N_2^{(e)}, \dots, \nabla N_n^{(e)}] = [\mathbf{B}_1^{(e)}, \mathbf{B}_2^{(e)}, \dots, \mathbf{B}_n^{(e)}] \end{aligned} \quad (2.56)$$

siendo $\mathbf{B}_i^{(e)} = \nabla N_i^{(e)}$ la matriz de gradientes del nodo i del elemento e . Obsérvese que $\mathbf{B}^{(e)}$ está compuesta de tantas submatrices $\mathbf{B}_i^{(e)}$ como nodos tiene el elemento. Así, por ejemplo, para un elemento triangular de tres nodos

$$\mathbf{B}^{(e)} = \left[\begin{array}{c|c|c} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_2^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_3^{(e)}}{\partial x} \\ \hline \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_2^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_3^{(e)}}{\partial y} \end{array} \right]; \quad \mathbf{B}_i^{(e)} = \left[\begin{array}{c} \frac{\partial N_i^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^{(e)}}{\partial y} \end{array} \right] = \frac{1}{2A^{(e)}} \begin{Bmatrix} b_i^{(e)} \\ c_i^{(e)} \end{Bmatrix} \quad (2.57)$$

El vector de flujos se expresa en función de las variables nodales por

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}\mathbf{g} = -\mathbf{D}\mathbf{B}^{(e)}\mathbf{a}^{(e)} \quad (2.58)$$

Aplicando el método de residuos ponderados de Galerkin a las ecuaciones de gobierno en la forma usual se obtiene el sistema de ecuaciones de la discretización en la forma $\mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{f}$ en donde la matriz \mathbf{K} y el vector \mathbf{f} se obtienen ensamblando las contribuciones elementales en la forma usual.

La expresión de la matriz de rigidez del elemento puede escribirse en forma genérica por

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^{(e)T} \mathbf{D} \mathbf{B}^{(e)} d\Omega + \int_{\Gamma_q^{(e)}} \alpha [\mathbf{N}^{(e)}]^T \mathbf{N}^{(e)} d\Gamma \quad (2.59)$$

con

$$K_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} [\mathbf{B}_i^{(e)}]^T \mathbf{D} \mathbf{B}_j^{(e)} d\Omega + \int_{\Gamma_q^{(e)}} \alpha N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Gamma \quad (2.60)$$

La expresión de $\mathbf{K}^{(e)}$ anterior es válida para problemas uni, bi y tridimensionales. Obviamente, en cada caso las integrales se efectúan sobre el dominio elemental correspondiente y su parte del contorno donde se prescribe el flujo normal, en su caso.

El vector de flujos nodales equivalentes del elemento puede también escribirse matricialmente por

$$\mathbf{f}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} [\mathbf{N}^{(e)}]^T Q d\Omega - \oint_{\Gamma_q^{(e)}} [\mathbf{N}^{(e)}]^T [\bar{q} - \alpha \phi_{\text{ext}}] - \mathbf{q}_n^{(e)} \quad (2.61)$$

con

$$f_i^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} Q d\Omega - \oint_{\Gamma_q^{(e)}} N_i^{(e)} [\bar{q} - \alpha \phi_{\text{ext}}] d\Gamma - q_{n_i}^{(e)} \quad (2.62)$$

Como antes, las integrales se calculan sobre el dominio elemental correspondiente.

Se recuerda, asimismo, que $\mathbf{q}_n^{(e)}$ es el vector de flujo “reacción” en los nodos del elemento que salen del contorno Γ_ϕ donde la variable ϕ está prescrita.

Es interesante remarcar de nuevo que la formulación matricial anterior proporciona un marco general para la solución de cualquier problema de Poisson en una, dos y tres dimensiones. El planteamiento matricial aquí utilizado se repite de forma casi idéntica al aplicar el MEF a otros problemas de mecánica en estructuras y fluidos.

2.7 FORMULACIÓN ISOPARAMÉTRICA

Presentaremos la formulación general de elementos isoparamétricos para el caso tridimensional. El caso bidimensional puede deducirse fácilmente prescindiendo de una de las tres coordenadas.

En la formulación isoparamétrica las coordenadas de un punto del elemento se expresan en función de las coordenadas nodales por

$$\mathbf{x} = \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} = \sum_{i=1}^n \mathbf{N}_i \begin{Bmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{Bmatrix} = \mathbf{N} \mathbf{x}^{(e)} \quad (2.63)$$

con

$$\mathbf{N} = [\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_2, \dots, \mathbf{N}_n]; \quad \mathbf{N}_i = \begin{bmatrix} N_i \\ N_i \\ N_i \end{bmatrix}; \quad N_i = f(\xi, \eta, \zeta) \quad (2.64)$$

donde N_i es la misma función de forma utilizada para interpolar el campo de desplazamientos.

La ec. (2.63) expresa una relación entre las coordenadas cartesianas y las naturales. Dicha relación es biunívoca si se cumple que el determinante del jacobiano de la transformación $x, y, z \rightarrow \xi, \eta, \zeta$ es de signo positivo en todos los puntos del elemento, lo que se cumple para los casos más usuales salvo para formas muy distorsionadas de los elementos.

Para el cálculo de las derivadas cartesianas de las funciones de forma se hace uso de la regla de derivación en cadena, que permite escribir en forma matricial

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = \mathbf{J}^{(e)} \frac{\partial \mathbf{N}_i}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.65)$$

donde $\mathbf{J}^{(e)}$ es la matriz jacobiana cuyas términos se calculan haciendo uso de las relaciones isoparamétricas (2.63) como

$$\mathbf{J}^{(e)} = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} x_i & \frac{\partial N_i}{\partial \xi} y_i & \frac{\partial N_i}{\partial \xi} z_i \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} x_i & \frac{\partial N_i}{\partial \eta} y_i & \frac{\partial N_i}{\partial \eta} z_i \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} x_i & \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} y_i & \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} z_i \end{bmatrix} \quad (2.66)$$

Invirtiendo (2.66) se encuentra la expresión de las derivadas cartesianas de N_i como

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = [\mathbf{J}^{(e)}]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} \quad (2.67)$$

Por otra parte, un diferencial de volumen se expresa por

$$dx \, dy \, dz = \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| d\xi \, d\eta \, d\zeta \quad (2.68)$$

Por tanto, combinando puede expresarse la matriz de gradientes del nodo i de un elemento isoparamétrico tridimensional en función de las coordenadas naturales como

$$\mathbf{B}_i(\xi, \eta, \zeta) = \begin{Bmatrix} \bar{b}_i \\ \bar{c}_i \\ \bar{d}_i \end{Bmatrix} \quad (2.69)$$

donde

$$\begin{Bmatrix} \bar{b}_i \\ \bar{c}_i \\ \bar{d}_i \end{Bmatrix} = \sum_{k=1}^3 \begin{Bmatrix} \bar{J}_{1k}^{(e)} \\ \bar{J}_{2k}^{(e)} \\ \bar{J}_{3k}^{(e)} \end{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi_k} \quad (2.70)$$

donde $\bar{J}_{ij}^{(e)}$ es el elemento ij de la de la matriz jacobiana inversa, $[\mathbf{J}^{(e)}]^{-1}$, $\xi_1 = \xi$, $\xi_2 = \eta$ y $\xi_3 = \zeta$.

La expresión genérica de la matriz de rigidez de un elemento tridimensional en coordenadas naturales es, por tanto

$$\begin{aligned} K_{ij}^{(e)} &= \iiint_{V^{(e)}} \mathbf{B}_i^T \mathbf{D} \mathbf{B}_j \, dV = \\ &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \mathbf{B}_i^T(\xi, \eta, \zeta) \mathbf{D} \mathbf{B}_j(\xi, \eta, \zeta) \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| d\xi d\eta d\zeta = \\ &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} G_{ij}(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta \end{aligned} \quad (2.71)$$

Es fácil apreciar de las expresiones de la inversa del jacobiano que en G_{ij} intervienen expresiones racionales por lo que su integración analítica es sumamente complicada y hay que recurrir a la integración numérica

En *elementos tetraédricos* que utilicen coordenadas de volumen la interpolación isoparamétrica se define similarmente a la ec. (2.63), siendo ahora $N_i = f(L_1, L_2, L_3, L_4)$. Si los tetraedros son de lados rectos el cálculo de las derivadas cartesianas de las funciones de forma es inmediato. Asimismo, las integrales sobre el elemento pueden calcularse exactamente. Si el elemento es

de lados curvos es más conveniente operar con las coordenadas naturales lo que simplemente implica sustituir L_2, L_3 y L_4 por α, β y γ , respectivamente, y L_1 por $1-\alpha-\beta-\gamma$. A partir de aquí el cálculo de las componentes de la matriz \mathbf{B}_i sigue idénticos pasos a los explicados entre las ecs. (2.66)-(2.70) para elementos hexaédricos, sin más que sustituir las coordenadas ξ, η, ζ por α, β, γ , respectivamente.

Por consiguiente, la matriz de rigidez del elemento tetraédrico isoparamétrico de lados curvos tiene una expresión similar a la (2.71), tal como

$$K_{ij}^{(e)} = \int_0^1 \int_0^{1-\alpha} \int_0^{1-\alpha-\beta} G_{ij}(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha d\beta d\gamma \quad (2.72)$$

donde la matriz $\mathbf{G}(\alpha, \beta, \gamma)$ se deduce de (2.71), teniendo en cuenta el cambio de variables mencionado.

2.8 INTEGRACIÓN NUMÉRICA EN TRES DIMENSIONES

2.8.1 Elementos hexaédricos

Sea $f(x, y, z)$ una función cualesquiera definida sobre un elemento hexaédrico isoparamétrico. Para calcular el valor de la integral de dicha función sobre el elemento efectuamos en primer lugar la transformación del dominio real al normalizado hexaédrico recto, es decir

$$\begin{aligned} \int \int \int_{V^{(e)}} f(x, y, z) dx dy dz &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\xi, \eta, \zeta) |\mathbf{J}^{(e)}| d\xi d\eta d\zeta = \\ &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} g(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta \end{aligned} \quad (2.73)$$

Si utilizamos la cuadratura de Gauss-Legendre, el valor de la integral se calcula por la expresión

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} g(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta &= \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \sum_{p=1}^{n_p} W_p g(\xi_p, \eta, \zeta) d\eta d\zeta = \\ &= \int_{-1}^{+1} \sum_{q=1}^{n_q} \sum_{p=1}^{n_p} W_p W_q g(\xi_p, \eta_q, \zeta) d\zeta = \sum_{r=1}^{n_r} \sum_{q=1}^{n_q} \sum_{p=1}^{n_p} W_p W_q W_r g(\xi_p, \eta_q, \zeta_r) \end{aligned} \quad (2.74)$$

donde n_p, n_q y n_r son el número de puntos de integración en cada una de las direcciones ξ, η y ζ ; ξ_p, η_q, ζ_r son las coordenadas del punto de integración (p, q, r) y W_p, W_q, W_r son los pesos correspondientes a cada dirección natural asociados a dicho punto.

Las coordenadas y los pesos para cada dirección se deducen directamente del caso unidimensional para el caso tridimensional. Recordemos que una

cuadratura de orden n en cada dirección natural integra exactamente un polinomio de grado $2n - 1$ ó menor en la correspondiente coordenada natural. En la Figura 2.4 se muestran las cuadraturas de $1 \times 1 \times 1$ y $2 \times 2 \times 2$ puntos.

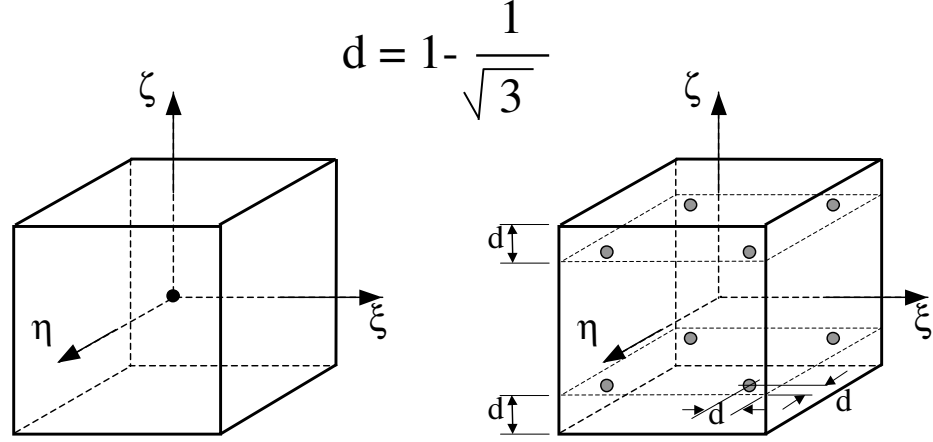


Figura 2.4: Cuadraturas de Gauss-Legendre de $1 \times 1 \times 1$ y $2 \times 2 \times 2$ puntos en elementos hexaédricos

2.8.2 Elementos tetraédricos

La cuadratura de Gauss para elementos tetraédricos que utilicen coordenadas de volumen se escribe como

$$\int_0^1 \int_0^{1-L_1} \int_0^{1-L_1-L_2} f(L_1, L_2, L_3, L_4) dL_1 dL_2 dL_3 = \sum_{i=1}^{n_p} f(L_{1i}, L_{2i}, L_{3i}, L_{4i}) W_i \quad (2.75)$$

La posición de los puntos de integración y los valores de las coordenadas de volumen y los pesos correspondientes para las cuadraturas lineal, cuadrática y cúbica se muestran en la Figura 2.5.

Se remarca que los pesos en la Figura 2.5 se han normalizado de manera que sumen $1/6$ para que el cálculo del volumen del elemento tetraédrico de cuatro nodos con la ec. (2.76) sea exacto. Así

$$\begin{aligned} V^{(e)} &= \iiint_{V^{(e)}} dV = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} |\mathbf{J}^{(e)}| d\xi d\eta d\zeta = \\ &= |\mathbf{J}^{(e)}| \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} d\xi d\eta d\zeta = \\ &= |\mathbf{J}^{(e)}| \sum_{i=1}^{n_p} W_i = 6V^{(e)} \sum_{i=1}^{n_p} W_i = \mathbf{V}^{(e)} \end{aligned} \quad (2.76)$$

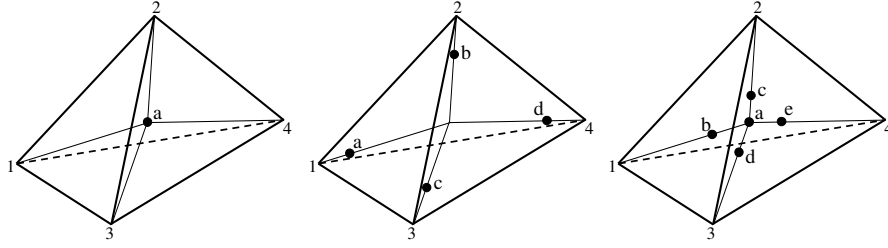


Figura	n_p	Precisión	Puntos	L_1	L_2	L_3	L_4	w_i	
(a)	1	Lineal	a	1/4	1/4	1/4	1/4	1/6	$\alpha = 0.58541020$
(b)	4	Cuadrática	a	α	β	β	β	1/24	$\beta = 0.13819660$ $\gamma = -\frac{2}{15}$
			b	β	α	β	β	1/24	
			c	β	β	α	β	1/24	
			d	β	β	β	α	1/24	
(c)	5	Cúbica	a	1/4	1/4	1/4	1/4	γ	$\delta = \frac{3}{40}$
			b	1/3	1/6	1/6	1/6	δ	
			c	1/6	1/3	1/6	1/6	δ	
			d	1/6	1/6	1/3	1/6	δ	
			e	1/3	1/6	1/6	1/3	δ	

Figura 2.5: Coordenadas y pesos de los puntos de integración en las cuadraturas de Gauss-Legendre: (a) lineal ($n_p = 1$), (b) cuadrática ($n_p = 4$) y (c) cúbica ($n_p = 5$) para elementos tetraédricos

2.8.3 INTEGRACIÓN NUMÉRICA DE LAS MATRICES Y VECTORES DEL ELEMENTO

De acuerdo con la ec.(2.74), el cálculo de la matriz de rigidez de un elemento hexaédrico isoparamétrico sería

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_{ij}^{(e)} &= \iiint_{V^{(e)}} \mathbf{B}_i^T \mathbf{D} \mathbf{B}_j dx dy dz = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \mathbf{B}_i^T \mathbf{D} \mathbf{B}_j \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| d\xi d\eta d\zeta = \\
&= \sum_{p=1}^{n_p} \sum_{q=1}^{n_q} \sum_{r=1}^{n_r} \left[\mathbf{B}_i^T \mathbf{D} \mathbf{B}_j \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| \right]_{p,q,r} W_p W_q W_r = \sum_{p=1}^{n_p} \sum_{q=1}^{n_q} \sum_{r=1}^{n_r} [\mathbf{G}_{ij}]_{p,q,r} W_p W_q W_r
\end{aligned} \tag{2.77}$$

El cálculo de los vectores de flujos nodales equivalentes que implican integrales sobre el volumen del elemento se efectuaría de manera idéntica.

Así, para las fuerzas de volumen debidas a un flujo distribuido

$$\begin{aligned}
f_i^{(e)} &= \iiint_{V^{(e)}} \mathbf{N}_i^T Q dx dy dz = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \mathbf{N}_i^T Q \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| d\xi d\eta d\zeta = \\
&= \sum_{p=1}^{n_p} \sum_{q=1}^{n_q} \sum_{r=1}^{n_r} \left[N_i Q \left| \mathbf{J}^{(e)} \right| \right]_{p,q,r} W_p W_q W_r
\end{aligned} \tag{2.78}$$

2.9 PROGRAMACIÓN DEL CÁLCULO DE $\mathbf{K}^{(e)}$ Y $\mathbf{f}^{(e)}$

El apartado precedente proporciona las expresiones necesarias para la programación del cálculo de las matrices de rigidez y el vector de flujos nodales equivalentes del elemento. En un capítulo posterior se describen con detalle todos los aspectos de dicha programación en el marco de un programa de elementos finitos para cálculo de estructuras de cualquier tipo.

No obstante, y con el objetivo de ir fijando ideas, describiremos seguidamente los diagramas de flujo de las subrutinas para cálculo de la matriz de rigidez y el vector de flujos nodales equivalentes (para generación de calor) en elementos cuadriláteros, que constituyen una parte fundamental del conjunto de la programación.

2.9.1 Subrutina para cálculo de la matriz de rigidez $\mathbf{K}^{(e)}$

De la ecuación (2.77) se deduce el diagrama de flujo para cálculo de $\mathbf{K}^{(e)}$ bidimensional que se muestra en la Figura 2.6.

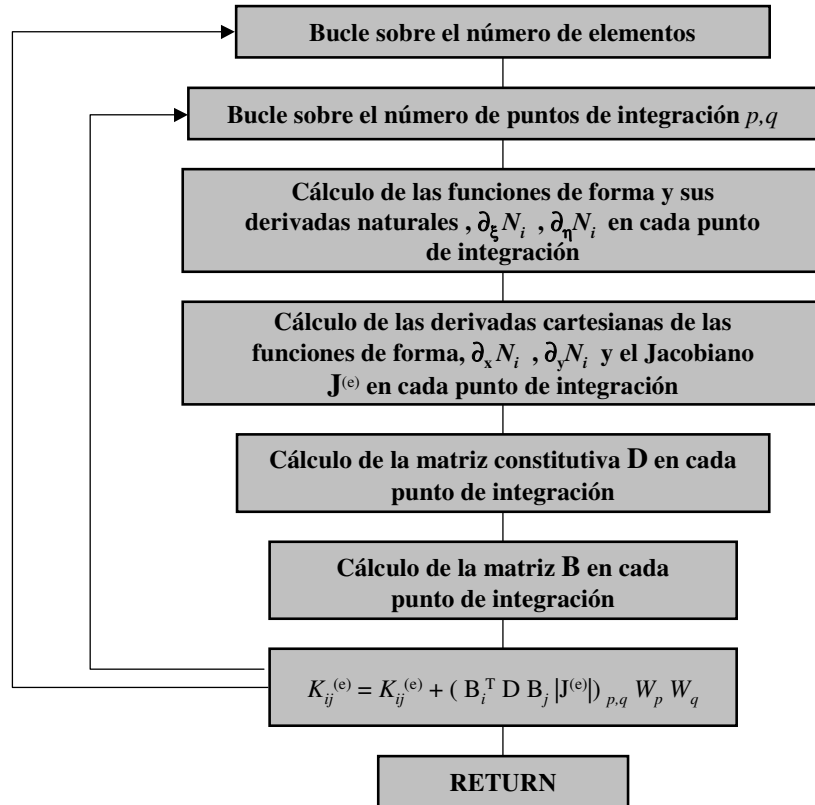


Figura 2.6: Diagrama de flujo para cálculo de $\mathbf{K}^{(e)}$

Si la matriz de conductividad \mathbf{D} es constante sobre el elemento su evaluación puede efectuarse una sola vez a nivel elemental, fuera del bucle sobre los puntos de integración. El caso de \mathbf{D} variable se trata de manera sencilla utilizando el concepto de interpolación isoparamétrica. Así, conociendo los valores de \mathbf{D} en cada nodo puede obtenerse su valor en cualquier punto interior del elemento por

$$\mathbf{D} = \sum_{i=1}^n N_i \mathbf{D}_i \quad (2.79)$$

La ec. (2.79) permite evaluar directamente \mathbf{D} en los puntos de integración, sustituyendo simplemente las coordenadas naturales de dichos puntos en las funciones de forma.

2.9.2 Subrutina para cálculo del vector de flujos nodales por generación de calor

De la ec. (2.78) se deduce el diagrama de flujo para cálculo del vector $\mathbf{f}^{(e)}$ para el caso bidimensional de flujos por generación de calor que se muestra en la Figura 2.7.

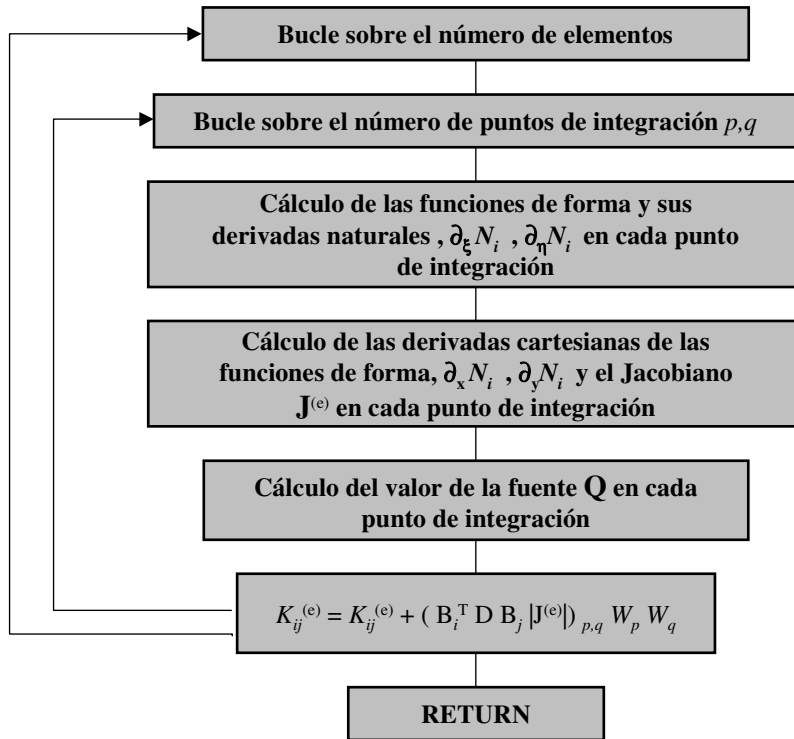


Figura 2.7: Diagrama de flujo para cálculo de $\mathbf{f}^{(e)}$ para flujos por generación de calor

De nuevo si el flujo Q es uniforme sobre el elemento, su cálculo puede efectuarse una sola vez a nivel elemental fuera del bucle de integración numérica. En caso contrario, su valor en los puntos de integración se calcula por interpolación de los valores nodales similarmente a lo explicado en la ec.(2.79).

Hay que destacar que los diagramas de flujo anteriores para cálculo de la matriz de rigidez y el vector de flujos nodales equivalentes por generación de calor del elemento son *totalmente generales* y de aplicabilidad directa a prácticamente todos los problemas que se tratan en este curso.

Capítulo 3

PROBLEMAS TRANSITORIOS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONDUCCIÓN

3.1 INTRODUCCIÓN

Aunque muchos problemas prácticos de transmisión del calor son dependientes del tiempo, en muchos casos prácticos de ingeniería basta con obtener la solución estacionaria. Por ejemplo, el campo de temperatura en una pieza o una estructura sometida a fuentes de calor y condiciones de contorno térmicas poco cambiantes con el tiempo, puede obtenerse resolviendo la ecuación de transmisión del calor por conducción mediante las técnicas explicadas en el capítulo anterior. Sin embargo, en otros problemas los efectos transitorios no pueden despreciarse. Este es el caso de estructuras o piezas sometidas a cargas térmicas variables con el tiempo o de tipo cíclico. Otro tipo de ejemplos son los problemas de cambio de fase (solidificación, fusión, etc.) que se estudiarán en un capítulo posterior. En todos estos casos es inevitable resolver la ecuación de transmisión del calor incorporando los términos de derivadas temporales de la temperatura. Por tanto, es necesario realizar una discretización en el tiempo de las ecuaciones de gobierno, además de la discretización espacial estudiada en el capítulo anterior.

En este capítulo estudiaremos la solución en el tiempo de la ecuación de transmisión de calor por efectos únicamente de conducción. De nuevo, este es un problema típico de transmisión del calor en sólidos (estructuras, piezas mecánicas, aparatos eléctricos, etc.). El caso de convección-conducción transitorio se estudiará en el Capítulo 4.

3.2 ECUACIONES BÁSICAS

La ecuación de gobierno se deduce de la ec. (1.20) prescindiendo del efecto de la convección por

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi - Q = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (3.1)$$

Las condiciones de contorno que se consideran son

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en } \Gamma_\phi \quad (3.2)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} + \alpha(\phi - \phi_{\text{ext}}) = 0 \quad \text{en } \Gamma_q \quad (3.3)$$

y la condición *inicial* es

$$\phi(x, y, z, 0) = \bar{\phi}_0(x, y, z) \quad (3.4)$$

3.3 OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE LA DISCRETIZACIÓN EN EL ESPACIO

Consideremos una discretización del dominio de análisis en elementos finitos en la forma usual. Dentro de cada elemento de n nodos utilizaremos una semi-discretización en el espacio y el tiempo definido por

$$\phi(x, y, z, t) \cong \hat{\phi}(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)}(x, y, z) \hat{\phi}_i(t) \quad (3.5)$$

donde N_i son las clásicas funciones de interpolación en el dominio espacial. La ec. (3.5) implica desacoplar la interpolación espacial de la utilizada para aproximar la variación de las incógnitas nodales $\hat{\phi}_i$ a lo largo del tiempo.

De la ec. (3.5) se deducen las derivadas espaciales y temporales de $\hat{\phi}$ como

$$\nabla \hat{\phi} = \sum_{i=1}^n \nabla N_i^{(e)} \hat{\phi}_i(t) \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} \frac{\partial \hat{\phi}_i}{\partial t} \quad (3.7)$$

Sustituyendo ahora la aproximación (3.5) en las ecuaciones de gobierno se obtiene

$$\rho c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} - Q = r_\Omega \quad (3.8)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + \bar{q} + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}}) = r_\Gamma \quad (3.9)$$

donde r_Ω y r_Γ son los residuos de la aproximación sobre el dominio espacial Ω y el contorno de Neumann Γ_q . Como es usual supondremos que la aproximación satisface *exactamente* las condiciones de contorno esenciales (3.2).

Procedamos ahora a obtener las ecuaciones de la discretización en el espacio. Para ello aplicamos el método de residuos ponderados a las ecs. (3.8) y (3.9). La expresión resultante es

$$\int_{\Omega} W \left[\rho c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} - Q \right] d\Omega + \int_{\Gamma_q} \bar{W} [\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + q + \alpha(\hat{\phi} - \phi_{\text{ext}})] d\Gamma = 0 \quad (3.10)$$

Utilizando el concepto de integral en sentido distribucional y repitiendo las operaciones de integración por partes explicadas en la ec. (2.11) se obtiene tras sustituir en (3.10) y escogiendo $W = \bar{W}$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} W \rho c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T W \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_q} \alpha W \hat{\phi} d\Gamma = \\ = \int_{\Omega} W Q d\Omega - \int_{\Gamma_q} W (\bar{q} - \alpha \phi_{\text{ext}}) d\Gamma - \int_{\Gamma_\phi} W \hat{q}_n d\Gamma \end{aligned} \quad (3.11)$$

El significado del término \hat{q}_n en (3.11) es el mismo que en la ec. (2.13). Obsérvese que la ecuación es idéntica a la (2.13) ó (2.14) a excepción del nuevo primer término proveniente de la derivada temporal.

Sustituyendo la aproximación (3.5) en (3.11) y escogiendo $W_i^{(e)} = N_i^{(e)}$ dentro de cada elemento (forma de Galerkin) se obtiene haciendo uso de las ecs. (3.6) y (3.7) la expresión matricial siguiente

$$\mathbf{C} \dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K} \mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (3.12)$$

En (3.12)

$$\mathbf{a} = [\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \dots, \hat{\phi}_n]^T \quad (3.13a)$$

y

$$\dot{\mathbf{a}} = \left[\frac{\partial \hat{\phi}_1}{\partial t}, \frac{\partial \hat{\phi}_2}{\partial t}, \dots, \frac{\partial \hat{\phi}_n}{\partial t} \right]^T \quad (3.13b)$$

Las expresiones de \mathbf{C} , \mathbf{K} y \mathbf{f} se obtienen ensamblando las contribuciones elementales en la forma usual. Las expresiones de $\mathbf{K}^{(e)}$ y $\mathbf{f}^{(e)}$ coinciden con las obtenidas en el caso estacionario (ver Apartado 2.3). La expresión de $\mathbf{C}^{(e)}$ es

$$\mathbf{C}^{(e)} = \begin{bmatrix} C_{11}^{(e)} & \dots & C_{1n}^{(e)} \\ & & \vdots \\ & & C_{nn}^{(e)} \end{bmatrix} \quad (3.14a)$$

con

$$C_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \rho c N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Omega \quad (3.14b)$$

La matriz \mathbf{C} se denomina matriz de *capacidad térmica*. Las expresiones (3.14) se denominan forma *consistente* de $\mathbf{C}^{(e)}$. Obsérvese que la matriz $\mathbf{C}^{(e)}$ obtenida de (3.14) es llena. La expresión de $C_{ij}^{(e)}$ se calcula en la práctica por integración numérica como

$$C_{ij}^{(e)} = \sum_{p=1}^{n_p} \rho c N_i N_j |J|_p W_p \quad (3.15)$$

donde n_p es el número de puntos de integración, W_p el peso asociado a cada punto y J el jacobiano de la transformación de coordenadas naturales en cartesianas. En la Figura 3.1 se muestran las expresiones de \mathbf{C} para los elementos más sencillos.

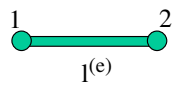
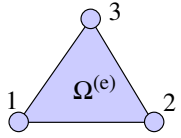
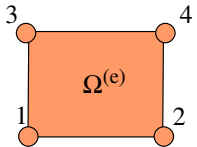
	Matriz $\mathbf{C}^{(e)}$ consistente	Matriz $\mathbf{C}^{(e)}$ diagonal
	$\frac{\rho c l^{(e)}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$	$\frac{\rho c l^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
	$\frac{\rho c \Omega^{(e)}}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$	$\frac{\rho c \Omega^{(e)}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
	$\frac{\rho c \Omega^{(e)}}{36} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$	$\frac{\rho c \Omega^{(e)}}{9} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Figura 3.1: Matrices $\mathbf{C}^{(e)}$ consistente y lagrangiana de elementos sencillos

3.4 MATRIZ DE CAPACIDAD TÉRMICA DIAGONAL

En la práctica por razones que se verán más tarde, es muy útil utilizar una expresión *diagonal* de $\mathbf{C}^{(e)}$. Un método muy sencillo propuesto por Hinton, Rock y Zienkiewicz (HRZ) para diagonalizar la matriz de masa consistente en problemas de dinámica estructural [13] se basa en utilizar solamente los términos diagonales de $\mathbf{C}^{(e)}$ y escalarlos para preservar la capacidad térmica total del elemento.

El esquema numérico es el siguiente:

1. Calcular sólo los términos de la diagonal de $\mathbf{C}^{(e)}$.
2. Calcular la capacidad térmica total del elemento $\mathbf{C}^{(e)}$

$$C^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \rho c d\Omega \quad (3.16)$$

3. Calcular un número s sumando los coeficientes de la diagonal de $\mathbf{C}^{(e)}$.
4. Escalar *todos* los coeficientes de la diagonal de $\mathbf{C}^{(e)}$ multiplicándolos por el cociente $C^{(e)}/s$. De esta manera se preserva la capacidad térmica total del elemento.

En las Figuras 3.1 y 3.2 se muestran ejemplos de las matrices $\mathbf{C}^{(e)}$ diagonales resultantes de aplicar el esquema anterior a elementos sencillos lineales y cuadráticos bidimensionales. La extensión de los resultados de esas figuras al caso tridimensional es inmediata.

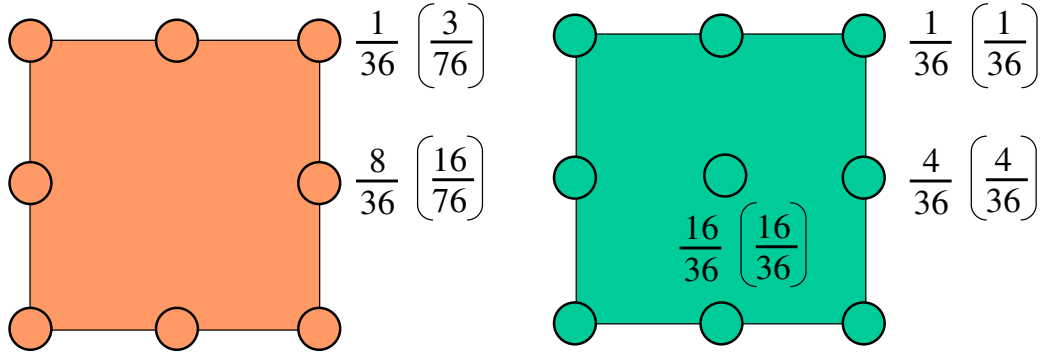


Figura 3.2: Matriz diagonal de los elementos serendípito de ocho nodos y lagrangiano de nueve nodos obtenidas con el esquema HRZ. Los números muestran la fracción de la masa total en cada nodo. Primer número: basado en una cuadratura de 2×2 . Segundo número: basado en una cuadratura de Gauss 3×3

La diagonalización de $\mathbf{C}^{(e)}$ puede también obtenerse utilizando una cuadratura de integración numérica especial que garantice la nulidad de los términos fuera de la diagonal. Esto ocurre cuando los puntos de integración coinciden con los nodos. Un ejemplo de este tipo es la cuadratura de Lobatto en elementos lagrangianos. Las matrices $\mathbf{C}^{(e)}$ diagonales obtenidas utilizando esta cuadratura en los rectángulos de 4 y 9 nodos coinciden con las de la Figuras 3.1. y 3.2 calculadas con el esquema HRZ.

En general no es posible obtener por integración numérica matrices $\mathbf{C}^{(e)}$ diagonales para elementos triangulares y cuadriláteros serendípticos con todos los coeficientes de la diagonal positivos. En estos casos es por tanto más conveniente utilizar el esquema HRZ antes explicado.

3.5 INTEGRACIÓN EN EL TIEMPO

La segunda etapa en la solución del problema transitorio de transmisión del calor por conducción es la integración en el tiempo del sistema de ecuaciones algebraicas (3.12) resultantes de la discretización espacial. En lo que sigue explicaremos dos técnicas de integración análogas pero conceptualmente diferentes.

3.5.1 Integración con elementos finitos en el tiempo

Consideremos un elemento finito unidimensional *en el dominio tiempo* que se extiende del tiempo t_n al t_{n+1} . La longitud del elemento es por tanto $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ (Figura 3.3). En dicho elemento se conoce el valor de las temperaturas en t_n (\mathbf{a}^n) y se quieren calcular la temperatura en t_{n+1} (\mathbf{a}^{n+1}). En el interior del elemento se supone que las temperaturas nodales varían linealmente en función de los dos valores extremos como

$$\mathbf{a} = N_n \mathbf{a}^n + N_{n+1} \mathbf{a}^{n+1} = (1 - \xi) \mathbf{a}^n + \xi \mathbf{a}^{n+1} \quad (3.17)$$

De (3.17) podemos obtener

$$\dot{\mathbf{a}} = \dot{N}_n \mathbf{a}^n + \dot{N}_{n+1} \mathbf{a}^{n+1} = \frac{\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{a}^n}{\Delta t} \quad (3.18)$$

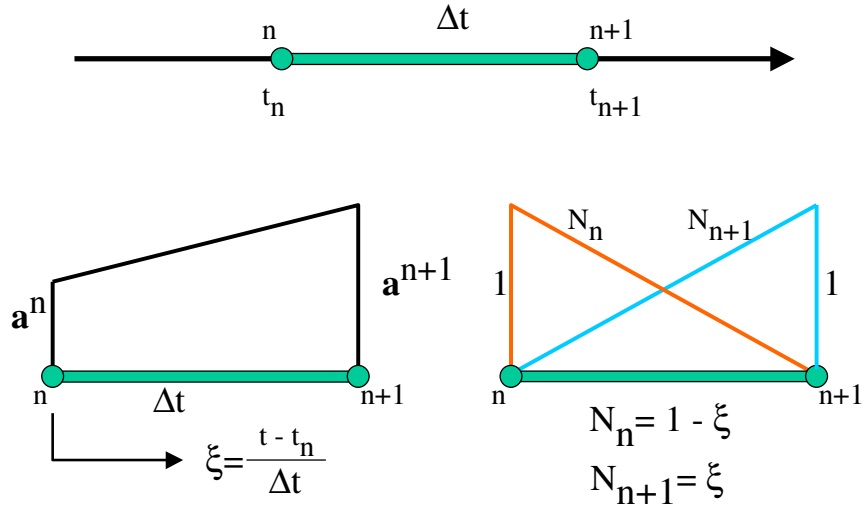


Figura 3.3: Elemento finito unidimensional lineal en el tiempo

Aplicamos ahora el método de residuos ponderados a la ec. (3.12). La expresión resultante es

$$\int_0^1 W(\mathbf{C}\dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{f})d\xi = 0 \quad (3.19)$$

siendo $W(t)$ una función de peso apropiada.

Sustituyendo (3.17) y (3.18) en (3.19) se tiene

$$\int_0^1 \left[W \left(\mathbf{C} \frac{\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{a}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{K} (N_n \mathbf{a}^n + N_{n+1} \mathbf{a}^{n+1}) - \mathbf{f} \right] d\xi = 0 \quad (3.20)$$

Agrupando términos se obtiene (suponiendo \mathbf{K} y \mathbf{C} constantes en el intervalo Δt)

$$\begin{aligned} & \left[\mathbf{K} \int_0^1 W \xi d\xi + \mathbf{C} \int_0^1 \frac{W}{\Delta t} d\xi \right] \mathbf{a}^{n+1} + \left[\mathbf{K} \int_0^1 W(1 - \xi) d\xi - \mathbf{C} \int_0^1 \frac{W}{\Delta t} d\xi \right] \mathbf{a}^n - \\ & - \int_0^1 W \mathbf{f} d\xi = 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

La expresión anterior puede reescribirse como

$$\left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \theta \mathbf{K} \right) \mathbf{a}^{n+1} + \left[(1 - \theta) \mathbf{K} - \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right] \mathbf{a}^n - \mathbf{f} = 0 \quad (3.22)$$

con

$$\theta = \frac{\int_0^1 W \xi d\xi}{\int_0^1 W d\xi} \quad (3.23)$$

$$\mathbf{f} = \frac{\int_0^1 W \mathbf{f} d\xi}{\int_0^1 W d\xi} \quad (3.24)$$

Suponiendo una aproximación lineal para \mathbf{f} dentro de Δt como $\bar{\mathbf{f}} = N_n \mathbf{f}^n + N_{n+1} \mathbf{f}^{n+1}$ se obtiene de (3.24)

$$\bar{\mathbf{f}} = (1 - \theta) \mathbf{f}^n + \theta \mathbf{f}^{n+1} \quad (3.25)$$

En la Figura 3.4 se muestran los valores del parámetro θ para diferentes funciones de peso W , la ec. (3.22) puede utilizarse para calcular \mathbf{a}^{n+1} en función \mathbf{a}^n y $\bar{\mathbf{f}}$ por

$$\mathbf{H} \mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{f}^n \quad (3.26a)$$

y

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{f}^n \quad (3.26b)$$

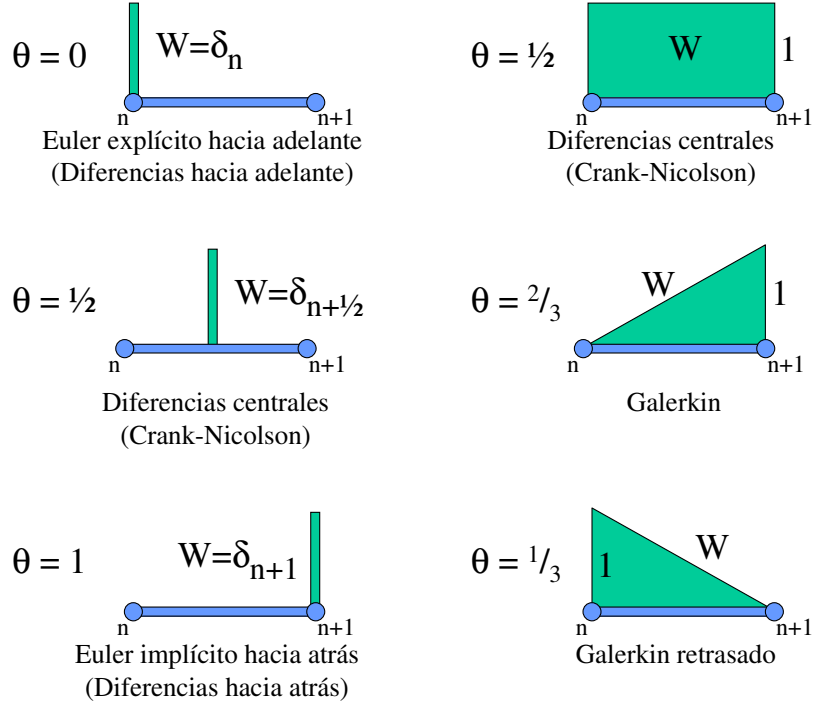


Figura 3.4: Valores de θ para diferentes funciones de ponderación en el tiempo

con

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} + \theta \mathbf{K} \quad (3.27)$$

$$\mathbf{f}^n = \bar{\mathbf{f}} - \left[(1 - \theta) \mathbf{K} - \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right] \mathbf{a}^n \quad (3.28)$$

Si $\theta = 0$, se obtiene un *esquema explícito* y

$$\mathbf{a}^{n+1} = \Delta t \mathbf{C}^{-1} \left[\mathbf{f}^n - \left(\mathbf{K} - \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \right) \mathbf{a}^n \right] \quad (3.29)$$

El cálculo de \mathbf{a}^{n+1} por (3.29) se simplifica enormemente si \mathbf{C} es diagonal. En este caso pueden obtenerse las temperaturas nodales directamente por

$$\hat{\phi}_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{C_{ii}} \left[f_i^n - \left(K_{ij} - \frac{1}{\Delta t} C_{ij} \right) \hat{\phi}_j^n \right], \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (3.30)$$

Desgraciadamente el esquema (3.30) es *condicionalmente estable* y obliga a utilizar incrementos de tiempo pequeños, como se explicará en un apartado posterior.

3.5.2 Integración en el tiempo por el método de diferencias finitas

Seleccionemos un punto intermedio $t_{n+\alpha}$ dentro del intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. Obviamente para $\alpha = 0$ coincide $t_{n+\alpha}$ con t_n y para $\alpha = 1$ con t_{n+1} (Figura 3.5).

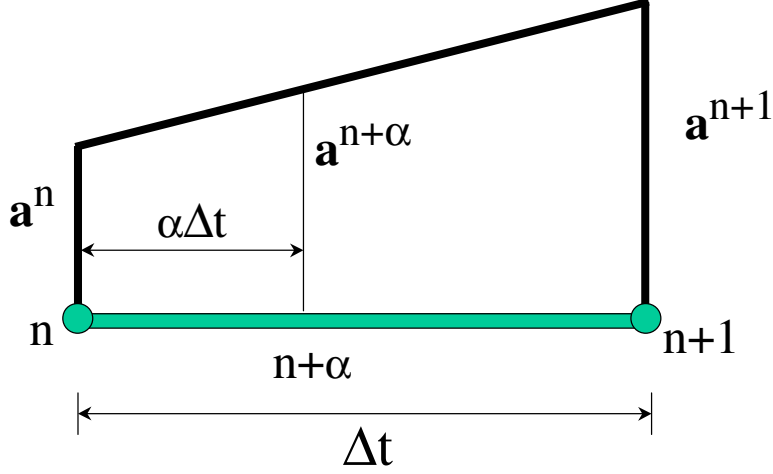


Figura 3.5: Selección de un punto intermedio en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$

Supongamos ahora que las ecuaciones de la discretización espacial (3.12) se satisfacen en el punto $t_{n+\alpha}$. Esto se escribe como

$$\mathbf{C}^{n+\alpha} \dot{\mathbf{a}}^{n+\alpha} + \mathbf{K}^{n+\alpha} \mathbf{a}^{n+\alpha} - \mathbf{f}^{n+\alpha} = 0 \quad (3.31)$$

La derivada $\dot{\mathbf{a}}^{n+\alpha}$ se calcula por

$$\dot{\mathbf{a}}^{n+\alpha} = \frac{\mathbf{a}^{n+\alpha} - \mathbf{a}^n}{\alpha \Delta t} \quad (3.32)$$

Sustituyendo (3.32) en (3.31) y operando se obtiene

$$\mathbf{C}^{n+\alpha} \frac{\mathbf{a}^{n+\alpha} - \mathbf{a}^n}{\alpha \Delta t} + \mathbf{K}^{n+\alpha} \mathbf{a}^{n+\alpha} - \mathbf{f}^{n+\alpha} = 0 \quad (3.33a)$$

$$\left[\frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}^{n+\alpha} + \mathbf{K}^{n+\alpha} \right] \mathbf{a}^{n+\alpha} = \mathbf{f}^{n+\alpha} + \frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}^{n+\alpha} \mathbf{a}^n \quad (3.33b)$$

En forma compacta

$$\mathbf{H}^{n+\alpha} \mathbf{a}^{n+\alpha} = \bar{\mathbf{f}}^{n+\alpha} \quad (3.34)$$

con

$$\mathbf{H}^{n+\alpha} = \frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}^{n+\alpha} + \mathbf{K}^{n+\alpha} \quad (3.35)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^{n+\alpha} = \mathbf{f}^{n+\alpha} + \frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}^{n+\alpha} \mathbf{a}^n \quad (3.36)$$

Calculando $\mathbf{a}^{n+\alpha}$ e invirtiendo (3.32) puede obtenerse el valor de \mathbf{a}^{n+1} por

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \Delta t \dot{\mathbf{a}}^{n+\alpha} = \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \mathbf{a}^n + \frac{1}{\alpha} \mathbf{a}^{n+\alpha} \quad (3.37)$$

Es fácil comprobar que para \mathbf{K} y \mathbf{C} constantes en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ este esquema es idéntico al explicado en el apartado anterior utilizando elementos finitos en el tiempo.

Así, tomando $\mathbf{K}^{n+\alpha} = \mathbf{K}$, $\mathbf{C}^{n+\alpha} = \mathbf{C}$ y $\mathbf{a}^{n+\alpha} = (1 - \alpha)\mathbf{a}^n + \alpha\mathbf{a}^{n+1}$ se obtiene tras sustituir en (3.33b)

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{C} + \alpha\mathbf{K}\right] \mathbf{a}^{n+1} = \left[(1 - \alpha)\mathbf{K} - \frac{1}{\Delta t}\mathbf{C}\right] \mathbf{a}^n - \mathbf{f}^{n+\alpha} = 0 \quad (3.38)$$

Para una variación lineal de \mathbf{f} en el intervalo de tiempo se tiene que $\mathbf{f}^{n+\alpha} = (1 - \alpha)\mathbf{f}^n + \alpha\mathbf{f}^{n+1}$. Comparando la expresión (3.38) con la (3.22) se comprueba que ambas son idénticas con $\alpha = \theta$. Por consiguiente el parámetro θ define el punto intermedio $t_{n+\theta} = t_n + \theta\Delta t$ en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ donde se satisface la ecuación diferencial en el tiempo.

Los algoritmos de integración temporal explicados en este apartado se denominan *de dos puntos*. En las referencias [6,14] se presentan algoritmos de integración en el tiempo de órdenes superiores.

3.6 ESTABILIDAD DE LA SOLUCIÓN TRANSITORIA

Los algoritmos de integración en el tiempo deben tener la propiedad de convergencia. Esto exige que el error de discretización en el tiempo debe acercarse a cero a medida que el incremento de tiempo disminuye. Las condiciones de convergencia de un algoritmo de integración son la estabilidad y la consistencia. La estabilidad asegura la ausencia de soluciones espúreas lejos de la solución física del problema (p.e. oscilaciones indeseables del campo de temperatura).

La consistencia implica que el error de truncamiento en la aproximación temporal se anula al disminuir el incremento de tiempo. Esta propiedad está asegurada en el esquema de dos pasos presentado en el apartado anterior [8].

Pasaremos, por tanto, a estudiar la estabilidad del algoritmo de dos pasos. Para ello consideremos en primer lugar los valores propios de la ecuación homogénea

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{0} \quad (3.39)$$

La solución general es del tipo $\mathbf{a} = \bar{\mathbf{a}}e^{-\omega t}$. Sustituyendo esta expresión en (3.39) se obtiene el sistema de valores propios

$$(-\omega\mathbf{C} + \mathbf{K})\bar{\mathbf{a}} = \mathbf{0} \quad (3.40)$$

Obviamente la solución natural $\mathbf{a} \neq 0$ exige

$$|(-\omega \mathbf{C} + \mathbf{K})| = 0 \quad (3.41)$$

De la ec. (3.41) se obtienen los N valores propios del sistema. Para cada valor propio ω_i se obtiene el vector propio asociado $\bar{\mathbf{a}}_i$ de (3.40).

La solución general de (3.34) puede por tanto escribirse como

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^N y_i \bar{\mathbf{a}}_i \quad (3.42)$$

donde y_i es la amplitud del valor propio $\bar{\mathbf{a}}_i$.

Los valores propios satisfacen la condición de ortogonalidad

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{a}}_i^T \mathbf{K} \bar{\mathbf{a}}_j &= 0 \quad \text{para } i \neq j \\ &= K_i \quad \text{para } i = j \\ \bar{\mathbf{a}}_i^T \mathbf{C} \bar{\mathbf{a}}_j &= 0 \quad \text{para } i \neq j \\ &= C_i \quad \text{para } i = j \end{aligned} \quad (3.43)$$

con $\omega_i = \frac{K_i}{C_i}$.

Sustituyendo (3.42) en (3.39) se obtiene

$$\mathbf{C} \sum_{i=1}^N \dot{y}_i \bar{\mathbf{a}}_i + \mathbf{K} \sum_{i=1}^N y_i \bar{\mathbf{a}}_i = 0 \quad (3.44)$$

Premultiplicando (3.44) por $\bar{\mathbf{a}}_j^T$ y haciendo uso de las propiedades de ortogonalidad (3.43) se obtiene el sistema de ecuaciones desacoplado siguiente

$$C_i \dot{y}_i + K_i y_i = 0, \quad j = 1, \dots, N \quad (3.45)$$

Aplicamos ahora el esquema de dos puntos de la ec. (3.22) (o (3.38)) a la ecuación anterior. El resultado es

$$\left(\frac{C_i}{\Delta t} + K_i \theta \right) y_i^{n+1} + \left[(1 - \theta) K_i - \frac{C_i}{\Delta t} \right] y_i^n = 0 \quad (3.46)$$

Con toda generalidad puede escribirse

$$y^{n+1} = \lambda y_i^n \quad (3.47)$$

Obviamente si $\lambda > 0$, la solución no se amortigua, lo cual se aparta de la solución física en este caso dada por una exponencial decreciente. Por otra parte, si $\lambda < 0$, la solución es oscilatoria (aunque converge si $\lambda > -1$). La condición de estabilidad es por tanto

$$|\lambda| < 1 \quad (3.48a)$$

o

$$-1 < \lambda < 1 \quad (3.48b)$$

Sustituyendo la ec. (3.47) en (3.46) se obtiene

$$\lambda \left(\frac{C_i}{\Delta t} + \theta K_i \right) + \left[(1 - \theta) K_i - \frac{C_i}{\Delta t} \right] = 0 \quad (3.49)$$

de donde se deduce

$$\lambda = \frac{1 - K_i(1 - \theta) \frac{\Delta t}{C_i}}{1 + K_i \theta \frac{\Delta t}{C_i}} \quad (3.50)$$

De la condición (3.48b) se deduce que

$$-1 < \frac{1 - K_i(1 - \theta) \frac{\Delta t}{C_i}}{1 + K_i \theta \frac{\Delta t}{C_i}} < 1 \quad (3.51)$$

Obsérvese que el numerador del cociente anterior es siempre menor que el denominador. Por tanto la condición $\lambda < 1$ se satisface siempre y sólo queda por cumplirse

$$-\left(1 + K_i \theta \frac{\Delta t}{C_i}\right) < 1 - K_i(1 - \theta) \frac{\Delta t}{C_i} \quad (3.52)$$

Recordando que $\omega_i = \frac{K_i}{C_i}$ es el i -ésimo valor propio del sistema, la condición (3.52) puede describirse como

$$\omega_i \Delta t (2\theta - 1) > -2 \quad (3.53)$$

lo que se cumple siempre que $\theta \geq 1/2$ (*estabilidad incondicional*).

Si $0 \leq \theta < 1/2$, el esquema es *condicionalmente estable*, debiendo cumplirse que

$$\omega_i \Delta t < \frac{2}{1 - 2\theta} \quad (3.54)$$

y

$$\boxed{\Delta t < \frac{2}{(1 - 2\theta)\omega_i}} \quad (3.55)$$

Nótese que para el esquema explícito ($\theta = 0$) la condición de estabilidad es

$$\Delta t < \frac{2}{\omega_i} \quad (3.56)$$

Es decir, el incremento de tiempo está gobernado por el valor propio mayor del sistema.

El estudio del coeficiente de amplificación λ proporciona información útil sobre la estabilidad del sistema. En la Figura 3.6 se muestra como varía λ con $\omega_i \Delta t$ para algunos de los distintos esquemas de integración en el tiempo mencionados. Se aprecia que en muchos de estos el valor de λ se acerca a -1 para un incremento de tiempo elevado; de hecho, el esquema de diferencias

finitas hacia atrás con $\theta = 1$ es el único que no presenta esta propiedad. Aunque puede demostrarse matemáticamente que el error del esquema de diferencias finitas centrales, usando $\theta = 1/2$, es de mayor orden, este esquema puede dar peores resultados que el de diferencias hacia atrás para intervalos de tiempo mayores.

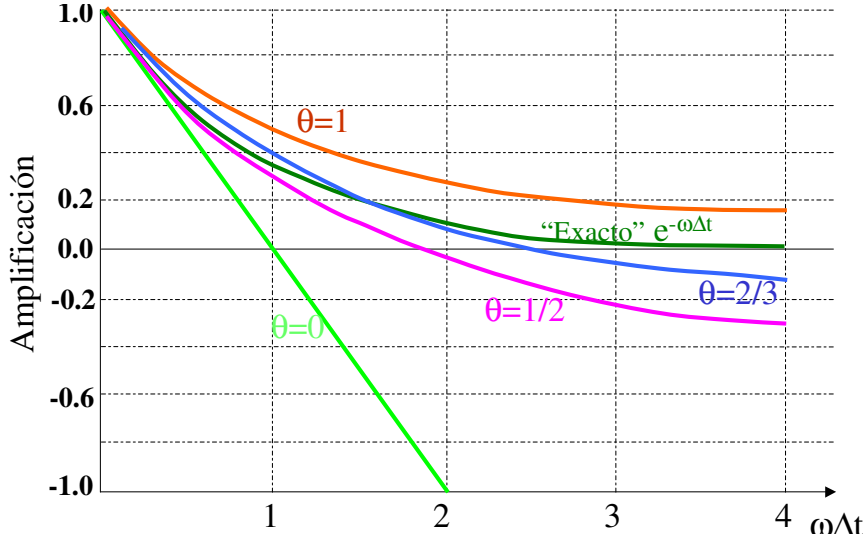


Figura 3.6: Variación del coeficiente de amplificación λ para varios algoritmos de integración en el tiempo

La respuesta en el tiempo de un sistema de muchos grados de libertad es una combinación de todas las respuestas modales. Afortunadamente, la mayor parte de la respuesta depende generalmente de los modos con valores propios ω_i pequeños. Cuando se utiliza un esquema incondicionalmente estable para un sistema con muchos grados de libertad, habitualmente se manejarán intervalos de tiempo mucho mayores que los que corresponden para obtener buenos resultados con las frecuencias más altas ω_i y así ocurre que el valor de λ es negativo para estos esquemas incondicionalmente estables y las oscilaciones pueden no amortiguarse como ocurriría en la práctica. Esto es particularmente notable para el esquema de Crank-Nicolson, $\theta = 1/2$, habiéndose desarrollado procedimientos numéricos para eliminar dichas oscilaciones. Todos esos procedimientos consisten en esencia en calcular la media de los valores que se obtienen para dos intervalos de tiempo sucesivos. La excitación más importante que da origen a dichas oscilaciones ocurre cuando el término \mathbf{f} varía bruscamente. Por consiguiente, conviene evitar dichas variaciones o tratarlas con cuidado especial.

Otro procedimiento que ayuda a eliminar la oscilación es emplear $\theta > 1/2$. En este contexto se ha encontrado que una manera de salir del paso es emplear el esquema de Galerkin con $\theta = 2/3$, habiéndose demostrado que resulta muy útil para problemas prácticos, desapareciendo todas las oscilaciones [6,13].

Los esquemas condicionalmente estables, con $0 \leq \theta < 1/2$, serán siempre inestables cuando el intervalo de tiempo utilizado en los cálculos exceda al que corresponde al valor propio mayor del sistema de acuerdo con la ec.(3.55). Esto limita seriamente el uso de esquemas explícitos. No obstante, la economía que se obtiene al no tener que invertir la matriz (solución repetida) compensa frecuentemente la necesidad de emplear muchos intervalos de tiempo pequeños.

La estimación del intervalo de tiempo crítico para esquemas condicionalmente estables aparentemente necesita el cálculo de los valores propios de todo el sistema. No es así. Considerando un elemento individual se puede acotar el valor propio más elevado. Esta propiedad fue establecida mediante un importante teorema propuesto por Irons, demostrando que el mayor valor propio del sistema debe ser siempre menor que el mayor valor propio de los elementos individuales [6].

Los límites de estabilidad anteriores tienen un significado más claro si se expresan en función de propiedades térmicas. Consideremos para ello un único elemento de longitud h con la temperatura en el nodo izquierdo prescrita a un valor nulo. La ec. (3.39) toma en este caso la sencilla expresión siguiente (utilizando la forma concentrada de la matriz \mathbf{C})

$$\frac{\rho ch}{2} \dot{\phi}_2 + \frac{k}{h} \phi_2 = 0 \quad (3.57)$$

De (3.57) se deduce el único valor propio de este problema por

$$\omega = \frac{2k}{\rho ch^2} \quad (3.58)$$

Sustituyendo en (3.56) se obtiene el límite de estabilidad para el esquema explícito por

$$\Delta t < \frac{\rho c}{k} h^2 \quad (3.59)$$

Obsérvese que el incremento de tiempo crítico depende del cuadrado del tamaño del elemento. La ec. (3.59) puede aplicarse para estimar el límite de estabilidad en problemas bi y tridimensionales tomando para h el mínimo tamaño de todos los elementos en la malla. En mallas finas este valor puede ser muy pequeño, especialmente si se utilizan elementos de orden alto en los que h corresponde a la distancia entre dos nodos próximos. En estos casos puede ser más competitivo utilizar un esquema implícito [6,13].

Capítulo 4

TRANSMISIÓN DEL CALOR POR CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN

4.1 INTRODUCCIÓN

En presencia de un campo de velocidades en un medio, el calor se transporta por convección, además de por conducción. La ecuación diferencial que gobierna el calor en este caso se denomina de convección-conducción. Su expresión para el caso general transitorio es (ver ec. (1.20))

$$\rho c \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}^T \nabla \phi \right) = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q \quad (4.1)$$

En lo que sigue supondremos que el campo de velocidades \mathbf{u} es conocido, constante en el tiempo y correspondiente a un fluido incompresible (divergencia nula). Esto, no obstante, no limita la aplicabilidad de la formulación a un campo de velocidades variable en el tiempo. Para resolver el problema de la transmisión del calor acoplada con la dinámica de fluidos, como ocurre en el caso de la convección natural, es preciso resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para obtener el campo de velocidades variable. En el Capítulo 7 se tratará este problema.

En los apartados siguientes estudiaremos en primer lugar la solución del problema estacionario. Veremos que la aplicación directa del método de elementos finitos de Galerkin conduce a problemas serios de inestabilidad cuando el valor de la velocidad es alto. Se presentan diferentes técnicas para sortear este problema y se comparan las analogías entre ellas, así como sus ventajas e inconvenientes.

En la parte final del capítulo se estudia la solución del problema de convección-conducción del calor transitoria. Es interesante destacar que el estudio de la solución numérica de la ecuación de convección-conducción es el primer

paso para el desarrollo de métodos numéricos adecuados para resolver problemas de dinámica de fluidos.

4.2 LA SOLUCIÓN DE CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN DEL CALOR ESTACIONARIA

La ecuación de convección-conducción del calor estacionaria se obtiene prescindiendo del término de derivada temporal en la ec. (4.1). Así, en general, dicha ecuación puede escribirse como

$$-\mathbf{u}^T \nabla \phi + \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (4.2)$$

En problemas 2D isótropos

$$\mathbf{u} = [u, v]^T, \quad \nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right\} \quad \text{y} \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Las condiciones de contorno que se consideran son

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_\phi \quad (4.4a)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_q \quad (4.4b)$$

Por sencillez se prescinde en la condición (4.4b) de los términos de convección y de radiación no lineal (ver ecs.(1.29)–(1.30)). La inclusión de dichos términos no invalida ninguna de las conclusiones de los apartados siguientes.

4.2.1 Discretización en elementos finitos

Construyamos una discretización de elementos finitos sobre el dominio de análisis Ω . La interpolación estándar en el interior de un elemento e con n nodos y área $\Omega^{(e)}$ se escribe por

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} \phi_i^{(e)} \quad (4.5)$$

donde $N_i^{(e)}$ son las funciones de forma y $\phi_i^{(e)}$ los valores nodales de $\hat{\phi}$ (por sencillez prescindimos del “sombrero” \wedge sobre $\phi_i^{(e)}$).

La forma residual discreta de las ecs. (4.2)–(4.4) se escribe como

$$\int_{\Omega} w_i (-\mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} + \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + Q) d\Omega + \int_{\Gamma_q} \bar{w}_i (\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + \bar{q}) d\Gamma = 0 \quad i = 1, N \quad (4.6)$$

En (4.6) \bar{w}_i y w_i son funciones de peso que satisfacen $w_i = \bar{w}_i = 0$ sobre Γ_ϕ y N es el número total de nodos en la malla. Integrando por partes el término conductivo en la primera integral y escogiendo $w_i = -\bar{w}_i$ se obtiene

$$\int_{\Omega} (w_i \mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} + (\nabla^T w_i) \mathbf{D} \nabla \hat{\phi}) d\Omega = \int_{\Omega} w_i Q d\Omega - \int_{\Gamma_q} w_i \bar{q} d\Gamma - q_n^\phi \quad (4.7)$$

donde q_n^ϕ es el flujo normal en el contorno de Dirichlet Γ_ϕ donde se conoce el valor de ϕ . Recuérdese que q_n^ϕ se calcula a posteriori, una vez conocida la solución aproximada $\hat{\phi}$.

La ecuación (4.7) se escribe normalmente en forma matricial por

$$\mathbf{K} \mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (4.8)$$

donde $\mathbf{a} = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N]^T$ y la matriz \mathbf{K} y el vector \mathbf{f} se obtienen por ensamblaje de las contribuciones elementales siguientes

$$K_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} (w_i^{(e)} \mathbf{u}^T \nabla N_j^{(e)} + \nabla^T w_i^{(e)} \mathbf{D} \nabla N_j^{(e)}) d\Omega \quad (4.9a)$$

$$f_i^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} w_i^{(e)} Q d\Omega - \int_{\Gamma_q} w_i^{(e)} \bar{q} d\Gamma - q_{n_i}^\phi \quad (4.9b)$$

Como es usual el término en que interviene \bar{q} en (4.9b) sólo aparece, si el elemento tiene algún lado sobre el contorno Γ_q . Lo mismo sucede para el término $q_{n_i}^\phi$ que sólo interviene en nodos sobre el contorno Γ_ϕ . Como se comentó más arriba, dicho término se calcula a posteriori.

La forma de Galerkin de las ecs. (4.6) y (4.9) se obtiene simplemente haciendo $w_i^{(e)} = N_i^{(e)}$ en el interior de cada elemento. Desgraciadamente la formulación de Galerkin es inestable para valores de la convección altos. Estudiaremos este problema en los apartados siguientes para el sencillo caso unidimensional.

4.2.2 Expresiones para el elemento unidimensional de dos nodos

Consideremos la solución del problema unidimensional utilizando elementos lineales de dos nodos. La aproximación (4.5) se escribe

$$\hat{\phi} = \sum_{i=1}^2 N_i^{(e)} \phi_i \quad (4.10)$$

con $N_i^{(e)} = \frac{1}{2}(1 + \xi \xi_i)$ siendo $\xi = \frac{x-x_c}{l^{(e)}}$ y x_c la coordenada del centro del elemento.

Las expresiones de Galerkin de $\mathbf{K}^{(e)}$ y $\mathbf{f}^{(e)}$ de las ecs. (4.9) tienen en este caso la forma siguiente

$$\mathbf{K}^{(e)} = \left(\frac{k}{l}\right)^{(e)} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.11a)$$

$$\mathbf{f}^{(e)} = \frac{Ql^{(e)}}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (4.11b)$$

Los términos en que intervienen en \bar{q} y $q_{n_i}^\phi$ no se consideran en (4.11b), ya que sólo afectan a los nodos extremos del dominio 1D.

De la ec. (4.11a) se deduce la ecuación algebraica que relaciona los valores de ϕ en tres nodos de una malla de elementos de igual tamaño $l^{(e)} = l$ como

$$-\frac{u}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + \frac{k}{l}(-\phi_{i+1} + 2\phi_i - \phi_{i-1}) + Ql = 0 \quad (4.12)$$

Obsérvese que la ec. (4.12) es precisamente la misma que se obtendría con un esquema de diferencias finitas centradas aplicado a la forma 1D de la ec.(4.2). Esto corrobora la conocida analogía entre el método de elementos finitos de Galerkin y el de diferencias finitas centradas en problemas 1D.

4.2.3 Un sencillo ejemplo de inestabilidad numérica

Consideremos la solución del problema de convección-conducción unidimensional en el dominio de longitud $2l$ para un valor del término de fuente Q nulo. La ecuación de gobierno es

$$-u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) = 0 \quad \text{en} \quad 0 < x < 2l \quad (4.13)$$

con las condiciones esenciales

$$\phi = 0 \quad \text{en} \quad x = 0 \quad (4.14a)$$

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{en} \quad x = 2l \quad (4.14b)$$

La solución analítica (exacta) de la ec. (4.13) es

$$\phi = Ae^{\frac{u}{k}x} + B \quad (4.15)$$

donde A y B son constantes cuyos valores se obtienen aplicando las condiciones (4.14) por

$$A = \bar{\phi} \left(e^{\frac{ul}{k}} - 1 \right)^{-1}, \quad B = -A \quad (4.16)$$

Por simplicidad consideramos la solución numérica del problema con la malla de dos elementos de igual tamaño que se muestra en la Figura 4.1. La aplicación de las ecs. (4.11) da lugar a la ecuación siguiente que relaciona las temperaturas en los tres nodos 1, 2 y 3.

$$-u \frac{\phi_3 - \phi_1}{2l} + k \frac{\phi_3 - 2\phi_2 + \phi_1}{l^2} = 0 \quad (4.17)$$

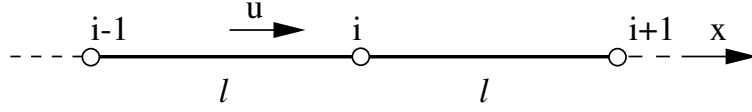


Figura 4.1: Malla de tres nodos uniformemente espaciados para la solución numérica del problema de conducción-convección del calor

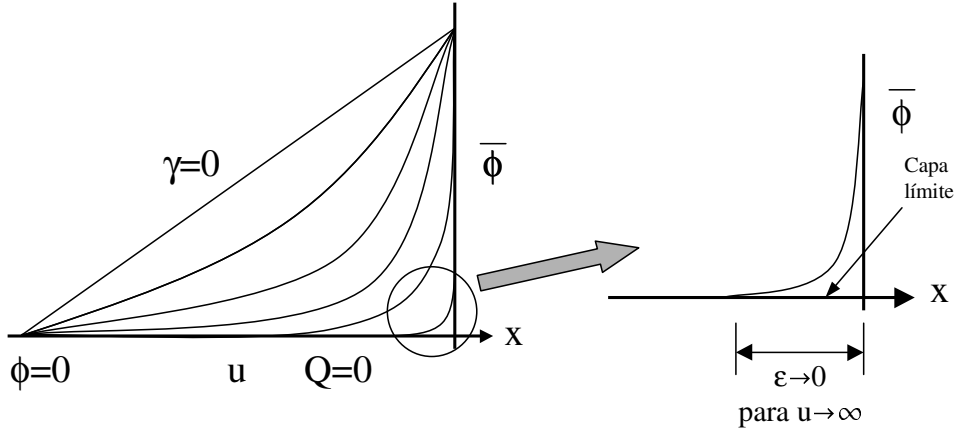


Figura 4.2: Solución exacta del problema de convección-conducción del calor unidimensional. Capa límite para el límite convectivo ($u \rightarrow \infty$)

Sustituyendo $\phi_1 = 0$ y $\phi_3 = \bar{\phi}$ en (4.17) se obtiene

$$\phi_2 = \frac{1}{2} (1 - \gamma) \bar{\phi} \quad (4.18)$$

donde

$$\gamma = \frac{ul^{(e)}}{2k} \quad (4.19)$$

es el denominado *número de Peclet* del elemento

Adviértase que para $\gamma = 0$ la solución $\phi_2 = \frac{\bar{\phi}}{2}$ coincide con la distribución exacta lineal del caso de conducción pura (ver Figura 4.3). Sin embargo, se aprecia de la ec. (4.18) que el valor de ϕ_2 se hace negativo para $\gamma > 1$. Este resultado no es físico, ya que el valor de la temperatura en el nodo 2 debe ser siempre mayor o igual a cero (el valor de $\phi_2 = 0$ se obtiene como límite de la solución exacta para $\gamma \rightarrow \infty$).

Se deduce de este sencillo ejemplo que el popular esquema de Galerkin (o el análogo de diferencias finitas centradas) no funciona para valores altos del número de Peclet (valores elevados de u o pequeños de k). Ciertamente la solución mejora con el refinamiento de la malla, ya que al reducir el tamaño del elemento disminuye también el número de Peclet elemental. Para un valor de la velocidad determinada, el tamaño del elemento que garantiza $\gamma < 1$ se

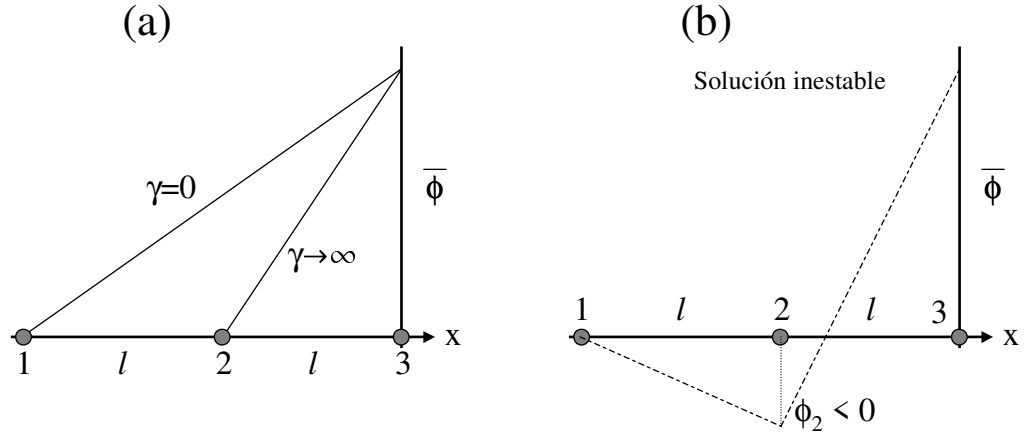


Figura 4.3: Solución numérica del problema de convección-conducción para una discretización con tres puntos uniformemente espaciados. a) Soluciones para el límite conductivo ($\gamma = 0$) y convectivo ($\gamma = \infty$). b) Solución numérica inestable

obtiene de (4.19) por $l^{(e)} < \frac{2k}{u}$. Este tamaño sería prohibitivamente pequeño para valores altos de la velocidad.

Estudiaremos a continuación diversas técnicas para corregir este defecto de la formulación de Galerkin.

4.2.4 Esquema de difusión artificial

Un estudio del error de truncamiento de la formulación de Galerkin (o del método de diferencias finitas centradas) conduce al esquema siguiente

$$-u \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2l} + k \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{l^2} = -u\phi'_i + (k - k^*) \phi''_i \quad (4.20)$$

donde (\cdot) y $(\cdot)'$ denotan, respectivamente, valores calculados en el punto i y la derivada con respecto a x .

En (4.20)

$$k^* = \frac{k}{2\gamma} \left\{ \sin h(2\gamma) - \frac{1}{\gamma} [\cos h(2\gamma) - 1] \right\} \geq 0 \quad (4.21)$$

es una constante positiva que puede interpretarse como una conductividad adicional que resta del coeficiente de conductividad real k . El segundo miembro de la ec. (4.20) es el *error de truncamiento*. Dicha ecuación indica que el algoritmo numérico resuelve en forma exacta en los nodos la ecuación siguiente.

$$-u \phi' + (k - k^*) \phi'' = 0 \quad (4.22)$$

Es decir, se resuelve una ecuación diferencial modificada con un coeficiente de conductividad dado por $(k - k^*)$.

Un estudio de la ec. (4.21) indica que $k^* > k$ para $\gamma \geq 1$. Claramente para $k^* > k$ la conductividad efectiva de la ecuación modificada que realmente se resuelve, se hace negativa. Esto conduce a la inestabilidad descrita en el apartado anterior.

Una solución obvia al carácter subdifusivo del esquema de Galerkin, es añadir a la ecuación diferencial original un término de conductividad adicional, conocido en la práctica como término de “difusión artificial”. De los razonamientos del apartado anterior se intuye que este término debería ser proporcional al número de Peclet, es decir, debería aumentar con la velocidad y el tamaño de la malla. La ecuación diferencial de gobierno modificada se escribe usualmente como

$$-u \phi' + \left(k + \alpha \frac{u l}{2} \right) \phi'' = 0 \quad (4.23)$$

donde $\alpha \geq 0$ es un parámetro de estabilización que controla la cantidad de difusión artificial que se introduce en la ecuación diferencial de balance.

Si se repite el sencillo ejemplo de dos elementos de la Figura 4.1, comenzando con la ec. (4.23) se obtiene

$$\phi_2 = \frac{1}{(1 + \alpha \gamma)} (1 + \alpha \gamma - \gamma) \bar{\phi} \quad (4.24)$$

Claramente ahora $\phi_2 \geq 0$ si

$$\alpha \geq 1 - \frac{1}{\gamma} \quad (4.25)$$

que es el *valor crítico* del parámetro de estabilización α que asegura una solución física del problema.

Es muy interesante obtener el valor de α que proporciona la solución nodal *exacta*. De la ec. (4.23) se deduce

$$\alpha = \frac{u \phi' - k \phi''}{\frac{u l}{2} \phi''} = \frac{2 \phi'}{l \phi''} - \frac{1}{\gamma} \quad (4.26)$$

La aplicación del esquema de Galerkin proporciona

$$\alpha = \frac{2 \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2 l}}{l \frac{\phi_{i+1} - 2 \phi_i + \phi_{i-1}}{l^2}} - \frac{1}{\gamma} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - 2 \phi_i + \phi_{i-1}} - \frac{1}{\gamma} \quad (4.27)$$

Sustituyendo la solución exacta (4.15) en (4.27) se obtiene

$$\alpha = \frac{e^\gamma + e^{-\gamma}}{e^\gamma - e^{-\gamma}} - \frac{1}{\gamma} = \coth \gamma - \frac{1}{\gamma} \quad (4.28)$$

que se denomina *valor óptimo* de α que proporciona la solución exacta en los nodos.

La Figura 4.4 muestra la variación de valores de α crítico y óptimo con el número de Peclet. Adviértase que dichos valores coinciden prácticamente para $\gamma > 2$. Esto indica que para aplicaciones prácticas puede utilizarse la más sencilla expresión (4.25). Nótese que el gran interés de esta expresión es que para su obtención no se necesitó conocer la forma de la solución exacta.

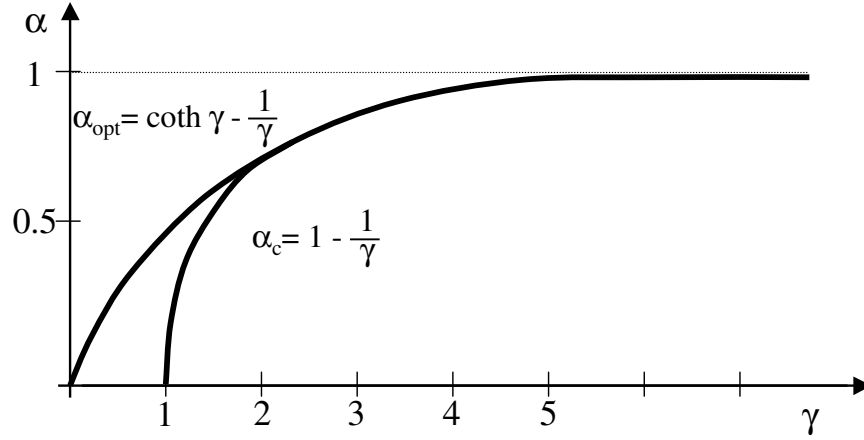


Figura 4.4: Valores óptimos y crítico del parámetro de estabilización α

4.2.5 Esquema de diferencias finitas contracorriente

Diversos autores culparon al esquema de diferencias centradas (que como hemos visto es idéntico al de EF de Galerkin) de ser la causa de las inestabilidades numéricas [6,15]. Por ello se propuso un esquema de diferencias alternativo basado en un cierto criterio de “causalidad”: la información aguas abajo de un punto no puede dar buena información para calcular los cambios en el término convectivo en ese punto. En otras palabras, la derivada convectiva debería calcularse utilizando información de puntos aguas arriba. Este fue el origen conceptual del denominado *esquema contracorriente*, que utiliza un esquema de diferencias hacia atrás para calcular la derivada $\frac{d\phi}{dx}$ por [6,15–21,26]

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{l} \quad (4.29)$$

Por otra parte se mantiene el esquema de diferencias centradas para el término conductivo de derivadas segundas.

La ecuación algebraica tipo para la solución de la ec. (4.13) utilizando el esquema contracorriente con una malla uniforme de tamaño de celda, es

$$-u \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{l} + k \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{l^2} = 0 \quad (4.30)$$

La solución del sencillo problema de la Figura 4.1 es ahora

$$\phi_2 = \frac{1}{2(1+\gamma)} \bar{\phi} \quad (4.31)$$

Adviértase que $\phi_2 \rightarrow \bar{\phi}/2$ para $\gamma \rightarrow \infty$ y $\phi_2 \rightarrow 0$ para $\gamma \rightarrow 0$. En consecuencia, el esquema de diferencias contracorriente preserva la solución física en los límites conductivo ($u = 0$) y convectivo ($k = 0$), eliminando los valores negativos obtenidos con el esquema de diferencias centradas.

4.2.6 Relación entre el esquema de diferencias contracorrientes y el de difusión artificial

Examinemos en detalle la ecuación tipo obtenida al aplicar el esquema de diferencias finitas centradas (o el análogo de EF de Galerkin) a la ecuación modificada (4.23) incorporando el término de difusión artificial. Tras unas sencillas operaciones se obtiene

$$-u \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{l} \alpha - u \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2l} (1 - \alpha) + k \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{l^2} = 0 \quad (4.32)$$

Adviértase que ahora para $\alpha = 0$ se obtiene la forma del esquema de diferencias centradas aplicado a todos los términos de la ecuación diferencial original (4.13). Esto se aprecia haciendo el subíndice $2 = i$ en la ec. (4.17). Por el contrario, para $\alpha = 1$ se obtiene el esquema de diferencias contracorriente de la ec. (4.30).

Se concluye por tanto que el esquema contracorriente proporciona la misma solución estable que el método de difusión artificial para el valor límite del parámetro de estabilización $\alpha = 1$. Esto explica el conocido hecho de que el esquema contracorriente proporciona generalmente resultados sobre-difusivos. Obviamente, la solución nodal exacta para todo el rango de números de Peclet ya no es posible con el esquema contracorriente y sólo se obtienen resultados precisos para valores de Peclet altos (que dan $\alpha \rightarrow 1$).

La ec. (4.32) proporciona también una interpretación muy instructiva del método de difusión artificial. El parámetro α puede interpretarse como un parámetro de interpolación que aproxima la expresión discreta de la derivada convectiva entre su valor para el esquema de diferencias centradas ($\alpha = 0$) y el valor obtenido con el esquema contracorriente ($\alpha = 1$). Es obvio que utilizando en la ec. (4.32) el valor óptimo de α de la ec. (4.28) se obtendría la solución nodal exacta para cualquier valor del número de Peclet.

4.2.7 Esquema de Petrov-Galerkin

Las deficiencias observadas en el método de EF de Galerkin condujeron a algunos autores a utilizar una clase de funciones de peso diferentes definidas por [6]

$$w_i = N_i + \alpha F_i \quad (4.33)$$

donde N_i es la función de forma estándar del nodo i , F_i es una nueva función de peso y α el parámetro de estabilización.

Este procedimiento se denomina formulación de Petrov-Galerkin, ya que las funciones de peso son ahora diferentes de las funciones de forma [6,22–27].

Puede comprobarse que utilizando $F_i = (-1)^{i+1} \frac{3}{4} (1 - \xi^2)$ y elementos de dos nodos se obtiene el mismo sistema de ecuaciones para el caso con fuente nula ($Q = 0$) que el dado por la ec. (4.23). Esto conduce también, naturalmente, al mismo valor óptimo del parámetro de estabilidad de la ec. (4.28).

Una formulación de Petrov-Galerkin popular se basa en la siguiente definición de la función de peso [6]

$$w_i = N_i + \frac{\alpha l}{2} \frac{dN_i}{dx} \quad (4.34)$$

donde l es la longitud del elemento

La forma integral de residuos ponderados para la ecuación unidimensional de convección- conducción con condiciones de contorno de Dirichlet, se escribe como

$$\int_L \left(N_i + \frac{\alpha l}{2} \frac{dN_i}{dx} \right) \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) dx = 0 \quad (4.35)$$

donde L es la longitud del dominio 1D.

Adviértase que la derivada $\frac{dN_i}{dx}$ es discontinua entre elementos. Este problema se resuelve en la práctica aplicando la función de peso discontinua solamente en el interior de los elementos. La ec. (4.35) se escribe usualmente, por tanto, como

$$\begin{aligned} \int_L N_i \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) dx + \\ + \sum_e \int_{l^{(e)}} \frac{\alpha l^e}{2} \frac{dN_i}{dx} \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) dx = 0 \end{aligned} \quad (4.36)$$

donde el sumatorio se extiende sobre todos los elementos de la malla n_e y $l^{(e)}$ es la longitud del elemento e .

La ec. (4.36) se denomina *forma de Galerkin perturbada consistente*, ya que añade a la expresión de Galerkin original un término que es función del residuo de la solución; esto es, un término que se hace cero al aproximar la solución numérica a la solución exacta analítica.

La forma de Galerkin perturbada puede escribirse de modo general como

$$\int_L N_i \hat{r} dx - \sum_e \int_{l^{(e)}} \tau^e P(N_i) \hat{r} dx = 0 \quad (4.37)$$

donde $\tau^{(e)}$ tiene unidades de tiempo y se denomina *parámetro de tiempo intrínseco* [25,26]. Dicho parámetro es una expresión alternativa del parámetro

de estabilización y se define para cada elemento por

$$\tau^e = \frac{\alpha l^{(e)}}{2 |u|} \quad (4.38)$$

En (4.37) $P(N_i)$ es un operador diferencial que actúa sobre las funciones de forma N_i . Por ejemplo, en la ec. (4.36) $P := -u \frac{d}{dx}$. Obviamente pueden escogerse muchas otras formas para la función P .

El término \hat{r} en la ec. (4.37) es el error o “residuo” de la solución numérica en cada punto de la malla dado por

$$\hat{r} = -u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \quad (4.39)$$

La segunda integral en la ec. (4.37) tiene por tanto la misión de estabilizar las deficiencias del método de Galerkin. La forma de dicha integral se presta a la obtención de infinitos métodos de estabilización “consistentes”, escogiendo diferentes expresiones para la función P . Cabe aquí la pregunta cuál de estos métodos tiene más sentido que los otros. En el Apartado 4.3 abordaremos la respuesta a esta cuestión.

4.2.8 Equivalencia entre los esquemas de Petrov-Galerkin y de difusión artificial

Apliquemos el método de Galerkin estándar a la ecuación modificada (4.23) incorporando el término de difusión artificial, esto es

$$\int_L N_i \left[-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + \left(k + \alpha \frac{u l}{2} \right) \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} \right] dx = 0 \quad (4.40)$$

El término $\alpha \frac{ul}{2} \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2}$ se integra por partes dando

$$\int_L \left[\left(N_i + \alpha \frac{l}{2} \frac{dN_i}{dx} \right) \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} \right) + N_i k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} \right] dx + c.c. = 0 \quad (4.41)$$

La ec. (4.41) muestra claramente que la aplicación del método de Galerkin a la ecuación modificada con la adición de la difusión artificial, conduce a una forma integral en la que el término convectivo está multiplicado por las funciones de peso w_i de la ec. (4.34). Se observa también que en el caso de elementos lineales y $Q = 0$ las ecs. (4.36) y (4.41) son idénticas, ya que el término de derivadas segundas de $\hat{\phi}$ se anula (¡incluso después de integrar por partes!). Esto explica porqué los esquemas de difusión artificial y de Petrov-Galerkin con w_i definida por (4.34) dan idénticos resultados para la solución de la ec. (4.13) utilizando elementos de dos nodos.

Esta equivalencia no se cumple si se considera el término de fuente Q . Por consiguiente, aunque el método de difusión artificial y el de Petrov-Galerkin dan resultados estables, se recomienda utilizar este último por razones de consistencia y de precisión.

4.2.9 Método de mínimos cuadrados de Galerkin

El método de mínimos cuadrados de Galerkin (MCG) puede formularse como un caso particular del procedimiento general de Petrov-Galerkin con las funciones de peso definidas por [26,28,29]

$$w_i = N_i + \tau^e \left(-u \frac{dN_i}{dx} + k \frac{d^2 N_i}{dx^2} \right) \quad (4.42)$$

El método MCG puede interpretarse también como un método de Galerkin perturbado escrito como [29]

$$\begin{aligned} & \int_L N_i \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2 \hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) dx - \\ & - \sum_e \int_{l(e)} \tau^e \left(-u \frac{dN_i}{dx} + k \frac{d^2 N_i}{dx^2} \right) \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2 \hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) dx = 0 \end{aligned} \quad (4.43)$$

Comparando las ecs. (4.37) y (4.43) se deduce la expresión de la función P para el método MCG como

$$P := -u \frac{d}{dx} + k \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.44)$$

El nombre de mínimos cuadrados en el método de MCG surge de la interpretación de la ec. (4.43) como la minimización del funcional siguiente

$$\mathcal{I} = \sum_e \int_{l(e)} \tau^e \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2 \hat{\phi}}{dx^2} + Q \right)^2 dx \quad (4.45)$$

Este procedimiento de obtención de funcionales variacionales es típico de métodos de mínimos cuadrados.

4.2.10 Método de multiescalas

El método de multiescalas (*subgrid scale method*) introducido originalmente por Hughes [30] es un procedimiento general y prometedor para generar diferentes métodos de estabilización [31–36]. La base del método de multiescalas es la hipótesis de que la solución numérica de la ecuación diferencial puede verse como un fenómeno de múltiples escalas, donde fundamentalmente conviven dos escalas de distinto tamaño. Claramente, la malla de análisis sólo puede capturar las escalas de tamaño mayor, mientras que las escalas de menor tamaño, denominadas escalas de la submalla, son mucho más pequeñas que las dimensiones del elemento o la celda de análisis.

Explicaremos seguidamente las bases del método de multiescalas para la solución de la ecuación de convección-conducción 1D.

La presencia de las dos escalas sugiere descomponer la función incógnita como $\phi = \hat{\phi} + \phi^*$, donde $\hat{\phi}$ y ϕ^* representan las escalas grande y pequeña, respectivamente. En consecuencia, sólo $\hat{\phi}$ puede resolverse por la malla.

Para avanzar, el método de multiescalas necesita introducir una hipótesis fuerte: las escalas irresolubles ϕ^* se anulan en los contornos del elemento. Así, $\phi^* = 0$ en $x = 0$ y $x = l^{(e)}$ para $e = 1, 2, \dots, n_e$.

La misma descomposición se aplica a la función de peso, es decir $w = \hat{w} + w^*$, donde \hat{w} y w^* son de nuevo las contribuciones del problema resoluble e irresoluble, respectivamente y $w^* = 0$ en los contornos elementales.

Introduciendo la descomposición de la variable y la función de peso en la aproximación de residuos ponderados del problema de Dirichlet 1D (ver ec. (4.6) con $\bar{w}_i = 0$) se obtienen dos ecuaciones, una para las escalas resolubles

$$\int_L \left[\left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} \right) \hat{w}_i + \left(-u \frac{d\phi^*}{dx} + k \frac{d^2\phi^*}{dx^2} \right) \hat{w}_i + Q\hat{w}_i \right] dx = 0 \quad (4.46)$$

y otra para las irresolubles

$$\int_L \left[\left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} \right) w_i^* + \left(-u \frac{d\phi^*}{dx} + k \frac{d^2\phi^*}{dx^2} \right) w_i^* + Qw_i^* \right] dx = 0 \quad (4.47)$$

Las expresiones de Euler-Lagrange de la ec. (4.47) son

$$-u \frac{d\phi^*}{dx} + k \frac{d^2\phi^*}{dx^2} = -\hat{r} \quad (4.48)$$

$$\phi^* = 0 \quad \text{para} \quad x = 0, x = l^{(e)} \quad (4.49)$$

donde el residuo \hat{r} se define como en la ec. (4.39). Adviértase que en la ec. (4.48) la parte irresoluble de la incógnita (ϕ^*) depende del residuo de la parte resoluble \hat{r} . Además, debido al carácter fuerte de las condiciones de contorno de Dirichlet (4.49) el problema se hace “local”, es decir, puede resolverse en el interior de cada elemento.

La solución de las ecs. (4.48) y (4.49) puede encontrarse utilizando una función de Green como

$$\phi^*(x) = - \int_{l^{(e)}} g(x, y) \hat{r}(y) dy \quad (4.50)$$

donde la función de Green $g(x, y)$ es la solución de la ecuación diferencial siguiente

$$-u \frac{dg}{dx} + k \frac{d^2g}{dx^2} = \delta(y - x) \quad (4.51)$$

con

$$g = 0 \quad \text{para} \quad x = 0, x = l^{(e)} \quad (4.52)$$

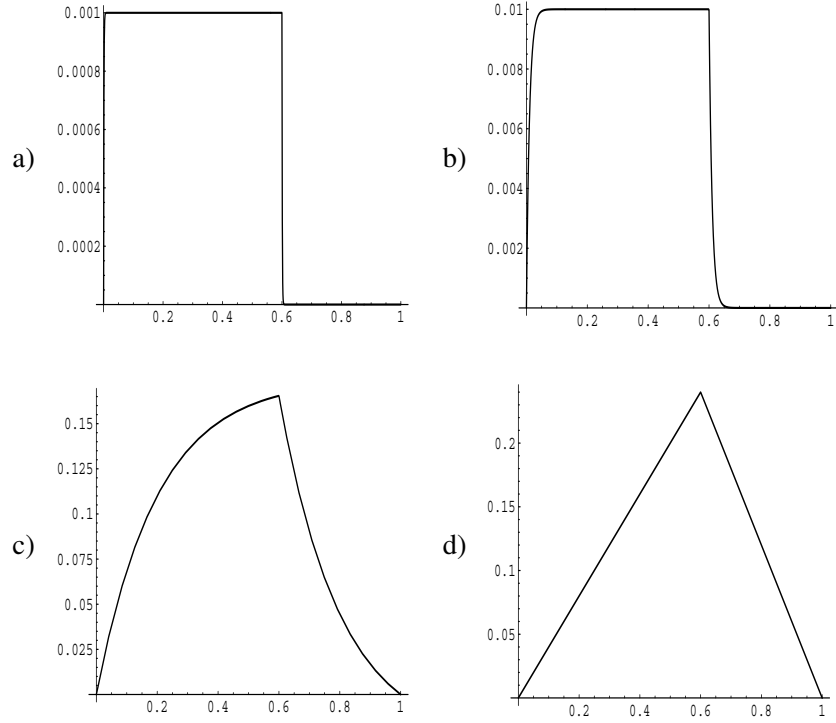


Figura 4.5: Funciones de Green elementales para $y = 0,6$ en el problema de convección-conducción 1D. a) $\gamma = 500$, b) $\gamma = 40$, c) $\gamma = 1$, d) $\gamma = 0$

donde $\delta(\cdot)$ es la función delta de Dirac. Como ejemplo se muestra en la Figura 4.5 la forma de las funciones de Green $g(x, y)$ para $y = 0,6$ y diferentes valores del número de Peclet.

Integrando por partes el segundo término de la ec. (4.46) puede obtenerse un algoritmo numérico estabilizado como

$$\int_L \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) \hat{w}_i dx + \sum_e \int_{l(e)} \left(u \frac{d\hat{w}_i}{dx} \phi^* - k \frac{d\phi^*}{dx} \frac{d\hat{w}_i}{dx} \right) dx = 0 \quad (4.53)$$

En la ecuación anterior los términos de contorno se han hecho nulos, ya que w y w^* (y por tanto $\hat{w} = w - w^*$) son cero en $x = 0$ y $x = L$.

Como es usual, la segunda integral en la ec. (4.53) se calcula únicamente en los interiores de los elementos para tener en cuenta la discontinuidad de las derivadas de las funciones de forma \hat{w} entre elementos.

Integrando por partes el segundo término de la segunda integral de (4.53) se tiene

$$\int_L \left(-u \frac{d\hat{\phi}}{dx} + k \frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} + Q \right) \hat{w}_i dx + \sum_e \int_{l(e)} \left(u \frac{d\hat{w}_i}{dx} + k \frac{d^2\hat{w}_i}{dx^2} \right) \phi^* dx = 0 \quad (4.54)$$

donde de nuevo no intervienen los términos de contorno.

Sustituyendo el valor de ϕ^* de (4.50) en (4.54) se obtiene finalmente

$$\int_L \hat{w}_i \hat{r} dx - \int_{l'_x} \int_{l'_y} \left(-u \frac{d\hat{w}_i}{dx} - k \frac{d^2 \hat{w}_i}{dx^2} \right) g(x, y) \hat{r}(y) dy dx = 0 \quad (4.55)$$

donde

$$\int_{l'} = \sum_e \int_{l(e)} \quad (4.56)$$

y \hat{r} se define por la ec. (4.39).

La ec. (4.56) puede escribirse en la forma de la ec. (4.37) aproximando adecuadamente la función de Green. Por ejemplo, puede hacerse la hipótesis siguiente

$$g(x, y) \approx \tilde{g}(x, y) := \tau(y) \cdot \delta(y - x) \quad (4.57)$$

donde $\tau(y)$ es la función de estabilización y δ es la función delta de Dirac. Insertando la ec. (4.57) en (4.55) se obtiene

$$\int_L \hat{w}_i \hat{r} dx - \sum_e \int_{l(e)} \tau \left(-u \frac{d\hat{w}_i}{dx} - k \frac{d^2 \hat{w}_i}{dx^2} \right) \hat{r}(x) dx = 0 \quad (4.58)$$

Adviértase que el operador $P(\cdot)$ de la ec. (4.37) es ahora

$$P := -u \frac{d}{dx} - k \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.59)$$

Comparando las ecuaciones (4.58) y (4.45) se aprecia que las diferencias entre los métodos de MCG y el de multiescalas se centran sólo en el signo del término de conducción en la función P .

La ec. (4.57) puede utilizarse para obtener una fórmula para calcular el parámetro de estabilización. Una doble integración da

$$\int_{l(e)} \int_{l(e)} \tau \cdot \delta(y - x) dx dy = \int_{l(e)} \int_{l(e)} g(x, y) dx dy \quad (4.60)$$

Para el sencillo caso 1D con fuente nula y elementos lineales de dos nodos se encuentra

$$\tau = \frac{1}{l} \int_{l(e)} \int_{l(e)} g(x, y) dx dy = \frac{l}{2u} \left(\coth \gamma - \frac{1}{\gamma} \right) \quad (4.61)$$

Sustituyendo la ec. (4.61) en (4.38) se obtiene la expresión del parámetro de estabilización óptimo $\alpha = \coth \gamma - \frac{1}{\gamma}$. Recuérdese que esta misma expresión se obtuvo en el Apartado 4.23 (ec. (4.27)) utilizando razonamientos muy diferentes.

4.3 MÉTODO DE CÁLCULO FINITESIMAL

Los métodos para estabilización de la solución numérica de la ecuación de convección-conducción presentados en los apartados anteriores, aunque muy utilizados en la práctica, se basan la mayoría en argumentos de carácter más bien heurístico. Todos requieren la adición de términos estabilizadores en la forma discreta y su efectividad está gobernada por un misterioso parámetro de estabilización. En este apartado mostraremos cómo los términos estabilizadores que aparecen en la mayor parte de los esquemas estudiados, emergen naturalmente aplicando la condición de balance de flujo sobre un dominio de tamaño “finito” [37–42].

4.3.1 Ecuación diferencial estabilizada

Consideremos la solución del problema de convección-conducción en el dominio unidimensional de la Figura 4.6. En la Figura 4.6 se muestra un segmento típico AB de longitud h donde debe satisfacerse el balance de flujos.

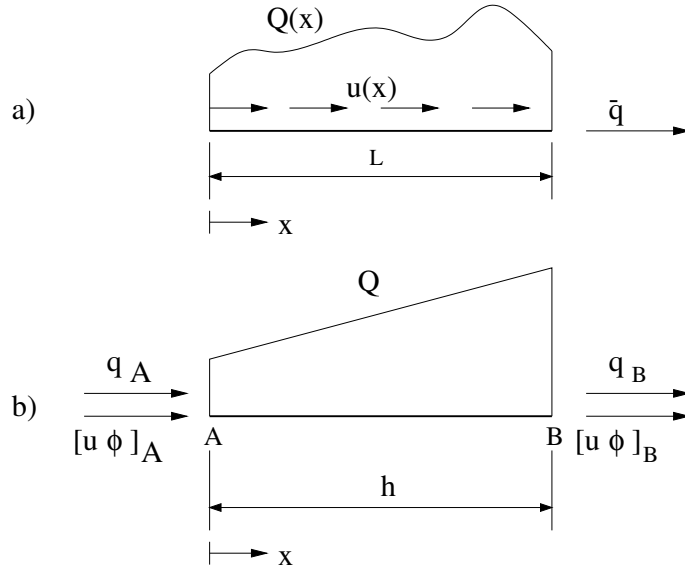


Figura 4.6: a) Problema de convección-conducción del calor unidimensional; b) Segmento AB donde se satisface balance de flujos

Para mayor sencillez supondremos en lo que sigue que la densidad ρ y el calor específico c son constantes y $\rho c = 1$. Suponiendo una distribución lineal de la fuente exterior Q sobre AB , el balance de flujos entre los puntos A y B se escribe como

$$q(x) + [u\phi](x) - q(x-h) - [u\phi](x-h) - \frac{1}{2}[Q(x) + Q(x-h)] h = 0 \quad (4.62)$$

Los valores de los flujos conductivo y convectivo q y $u\phi$ en el punto A pueden aproximarse en función de los valores en el punto B utilizando desarrollos en serie de Taylor. Así

$$[u\phi](x_B - h) = [u\phi](x_B) - h \left. \frac{d[u\phi]}{dx} \right|_B + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2[u\phi]}{dx^2} \right|_B - O(h^3) \quad (4.63)$$

$$q(x - h) = q(x) - h \frac{dq}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2q}{dx^2} - O(h^3) \quad (4.64)$$

Igualmente puede escribirse para la fuente Q

$$Q(x - h) = Q(x) - h \frac{dQ}{dx} + O(h^2) \quad (4.65)$$

Obsérvese que en las ecuaciones anteriores se ha utilizado un desarrollo de Taylor de un orden superior al usual en la teoría infinitesimal.

Sustituyendo las ecs. (4.63)-(4.65) en (4.62) se obtiene tras simplificar (suponiendo también u constante)

$$-u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q - \frac{h}{2} \frac{d}{dx} \left[-u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q \right] = 0 \quad (4.66a)$$

$$\boxed{r - \frac{h}{2} \frac{dr}{dx} = 0} \quad (4.66b)$$

donde

$$r := -u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q \quad (4.67)$$

Adviértase que para $h = 0$ se obtiene la forma infinitesimal clásica de la ecuación de convección-difusión unidimensional expresada por

$$r = -u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q = 0 \quad (4.68)$$

Condición de Neumann estabilizada

La condición esencial asociada a la ec. (4.66) es la estándar de Dirichlet dada por la ec. (4.4). Sin embargo, dado que la condición de Neumann es, de hecho, la ecuación de balance de flujos en el contorno, por coherencia debe ahora obtenerse utilizando los mismos criterios que en la obtención de la ecuación de balance modificada (4.66). Para ello consideremos el segmento AB donde se prescribe el flujo de calor. Por conveniencia tomaremos la longitud $\overline{AB} = \frac{h}{2}$.

La ecuación de balance sobre el contorno se obtiene considerando términos de un orden mayor que en la teoría infinitesimal. Así, suponiendo una fuente

constante Q distribuida sobre AB (este término no se incluye en la teoría infinitesimal) la ecuación de balance de flujo sobre AB se escribe como

$$\bar{q} - q(x_A) - [u\phi]_A - \frac{h}{2}Q = 0 \quad (4.69)$$

donde \bar{q} es el flujo de calor en $x = L$ y $x_A = x_B - \frac{h}{2}$.

Utilizando un desarrollo de Taylor de segundo orden para expresar los flujos convectivo y conductivo en el punto A en función de los valores en B y sustituyendo en (4.69) se obtiene

$$-u\phi + k \frac{d\phi}{dx} + \bar{q} - \frac{h}{2}r \quad \text{en } x = L \quad (4.70)$$

donde r viene dado por la ec. (4.67).

De nuevo para $h = 0$ se obtiene la forma infinitesimal usual de la condición de contorno de Neumann.

Las ecs.(4.66) y (4.70) son la forma estabilizada de las ecuaciones de convección-conducción *a nivel diferencial*. Mostraremos en los apartados siguientes que la discretización de dichas ecuaciones por la formulación de elementos finitos de Galerkin (o diferencias finitas centradas) conduce a esquemas numéricos estables. Con más generalidad puede afirmarse que las ecs. (4.66) y (4.70) son el punto de partida para el desarrollo de algoritmos numéricos estables para la solución de problemas de convección-conducción del calor.

4.3.2 Equivalencias con el esquema de difusión artificial

Un caso particular de la ecuación diferencial estabilizada se obtiene despreciando las contribuciones de los términos conductivos y de fuente en la derivada de r . La ecuación resultante es

$$-u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q + \frac{h}{2} \frac{d}{dx} \left(u \frac{d\phi}{dx} \right) = 0 \quad (4.71)$$

Escribiendo la longitud característica h como $h = \alpha l$ donde l es la longitud del elemento o de la celda de análisis se tiene

$$-u \frac{d\phi}{dx} + \frac{d}{dx} \left(k + \alpha \frac{ul}{2} \right) \frac{d\phi}{dx} + Q = 0 \quad (4.72)$$

Adviértase la coincidencia de la expresión anterior con la ec. (4.23) obtenida con el método de difusión artificial.

Puede, por tanto, afirmarse que la ecuación de balance obtenida con la técnica de cálculo “finitesimal” explicada en el apartado anterior, contiene intrínsecamente el término estabilizador atribuido a la difusión artificial. Dicho término se recupera de forma natural en la nueva ecuación diferencial estabilizada, con la simplificación arriba hecha [37–42].

Los términos de conducción y de fuente despreciados para obtener la ec. (4.65) contienen, sin embargo, información de gran utilidad como veremos en el apartado siguiente.

4.3.3 Equivalencia con la formulación de EF de Petrov-Galerkin

La formulación de Galerkin de las nuevas ecuaciones de gobierno obtenidas con el método de cálculo finitesimal coincide con la formulación Petrov-Galerkin descrita en el Apartado 4.2.7. Para demostrar esto sustituycamos la aproximación estándar de elementos finitos (4.5) en las ecs. (4.66b), (4.4) y (4.70). El resultado se escribe como

$$\hat{r} - \frac{h}{2} \frac{d\hat{r}}{dx} = r_\Omega \quad \text{en} \quad 0 \leq x \leq L \quad (4.73)$$

$$\hat{\phi} - \bar{\phi} = r_\phi \quad \text{en} \quad x = 0 \quad (4.74)$$

$$k \frac{d\hat{\phi}}{dx} + \bar{q} - \frac{h}{2} \hat{r} = r_q \quad \text{en} \quad x = L \quad (4.75)$$

donde $\hat{r} = r(\hat{\phi})$ y r_Ω , r_ϕ y r_Γ son los residuos de la solución aproximada en el dominio y en los contornos de Dirichlet y de Neumann, respectivamente. Como es usual, supondremos que la condición de Dirichlet se satisface automáticamente y, por tanto, $r_\phi = 0$ en $x = 0$.

La expresión de residuos ponderados de las ecs. (4.73) y (4.75) es

$$\int_0^L w_i \left(\hat{r} - \frac{h}{2} \frac{d\hat{r}}{dx} \right) dx + \left[\bar{w}_i \left(k \frac{d\hat{\phi}}{dx} + \bar{q} - \frac{h}{2} \hat{r} \right) \right]_{x=L} = 0 \quad (4.76)$$

Integrando por partes en un sentido distribucional el término $w_i \frac{h}{2} \frac{d\hat{r}}{dx}$ en (4.76) y escogiendo $w_i = \bar{w}_i$ se obtiene (suponiendo como siempre que $w_i = \bar{w}_i = 0$ en $x = 0$)

$$\int_0^L w_i \hat{r} dx - \left[w_i \left(k \frac{d\hat{\phi}}{dx} + \bar{q} \right) \right]_{x=L} + \sum_e \int_{l(e)} \frac{h}{2} \frac{dw_i}{dx} \hat{r} dx = 0 \quad (4.77)$$

La expresión de Galerkin se obtiene haciendo $w_i = N_i$. Se observa que la ecuación resultante es análoga a la forma perturbada de Galerkin de la ec. (4.37) con $P = -\frac{h}{2} \frac{d}{dx}$. Asimismo escogiendo $h = \alpha l^{(e)}$ la ec. (4.77) coincide con la expresión estabilizada (4.36) resultante de aplicar el esquema de Petrov-Galerkin a la ecuación diferencial estándar.

4.3.4 Equivalencia con el método de multiescalas

Supondremos una distribución cuadrática del término de fuente Q en la ec. (4.62) que se escribe ahora como

$$q(x) + [u\phi](x) - q(x-h) - [u\phi](x-h) + \frac{h}{6} \left[Q(x) + 4Q\left(x - \frac{h}{2}\right) + Q(x-h) \right] = 0 \quad (4.78)$$

Asimismo, desarrollaremos los flujos convectivo y difusivo en el punto $(x - h)$ incluyendo términos en h^3 y los términos fuente $Q(x - h)$ y $Q\left(x - \frac{h}{2}\right)$ incluyendo términos en h^2 . La expresión resultante, tras simplificar, es

$$r - \frac{h}{2} \frac{dr}{dx} + \frac{h^2}{6} \frac{d^2r}{dx^2} = 0 \quad (4.79)$$

donde r se define por la ec. (4.66).

La expresión de residuos de la ec. (4.79) para el problema de Dirichlet se escribe por

$$\int_0^l w \left[\hat{r} - \frac{h}{2} \frac{d\hat{r}}{dx} + \frac{h^2}{6} \frac{d^2\hat{r}}{dx^2} \right] dx = 0 \quad (4.80)$$

Integrando una vez por partes el término $w \frac{h}{2} \frac{d\hat{r}}{dx}$, dos veces el término $w \frac{h^2}{6} \frac{d^2\hat{r}}{dx^2}$ y haciendo $w = N_i$ se obtiene

$$\int_0^l N_i \hat{r} dx - \sum_e \int_{l^{(e)}} \left(-\frac{h}{2} \frac{dN_i}{dx} - \frac{h^2}{6} \frac{d^2N_i}{dx^2} \right) \hat{r} dx + b.c. = 0 \quad (4.81)$$

Obsérvese la analogía de esta expresión con la ec. (4.58) obtenida con el método de multiescalas.

4.4 PROBLEMA MULTIDIMENSIONAL

La formulación de Galerkin del MEF de las ecuaciones multidimensionales (4.2)-(4.4) conduce a los mismos problemas de estabilidad que los encontrados al resolver el caso 1D. Por ello, se han extendido a varias dimensiones las diferentes técnicas de estabilización desarrolladas para resolver el problema 1D. En los apartados que siguen presentaremos un resumen de los ingredientes básicos de estos desarrollos.

4.4.1 Método de difusión artificial y expresión de Galerkin perturbada en problemas multidimensionales

La idea natural de extender el método de difusión artificial a problemas 2D y 3D fue la de añadir la difusión estabilizadora adicional a lo largo de las líneas de corriente. La ecuación diferencial modificada en este caso es [6,18,20]

$$-\mathbf{u}^T \nabla \phi + \nabla^T (\mathbf{D} + \mathbf{D}^*) \nabla \phi + Q = 0 \quad (4.82)$$

donde

$$\mathbf{D}^* = \frac{\alpha l^{(e)}}{2|\mathbf{u}|} \mathbf{u} \mathbf{u}^T \quad (4.83)$$

es la matriz de difusión artificial. Puede comprobarse que \mathbf{D}^* tiene un valor propio diferente de cero de módulo $\frac{\alpha l^{(e)} |\mathbf{u}|}{2}$ y de dirección la del vector de

velocidad \mathbf{u} . La expresión de \mathbf{D}^* puede también obtenerse añadiendo la difusión anisotrópica $\frac{\alpha l^{(e)} |\mathbf{u}|}{2}$ en la dirección de \mathbf{u} y transformando la matriz de conductividad resultante a ejes globales según lo explicado en el Apartado 1.2.

En (4.83) α es el parámetro de estabilización y $l^{(e)}$ una dimensión característica del elemento. La forma más sencilla es tomar $l^{(e)} = (\Omega^{(e)})^{1/d}$ con $d = 1, 2, 3$ para problemas 1D, 2D Y 3D, respectivamente.

Escribamos ahora la expresión de elementos finitos de Galerkin para la ecuación modificada (4.82) suponiendo condiciones de contorno de Dirichlet.

El resultado es

$$\int_{\Omega} N_i [-\mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} + \nabla^T (\mathbf{D} + \mathbf{D}^*) \nabla \hat{\phi} + Q] = 0 \quad (4.84)$$

Integrando por partes el término de difusión artificial se obtiene

$$\int_{\Omega} \left[- \left(N_i + \frac{\alpha l^{(e)}}{2|\mathbf{u}|} \mathbf{u}^T \nabla N_i \right) \mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} + N_i (\nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + Q) \right] d\Omega + c.c. = 0 \quad (4.85)$$

La ecuación anterior muestra claramente que introducir la matriz de difusión artificial \mathbf{D}^* es equivalente a utilizar una ponderación de Petrov-Galerkin sobre el término convectivo, tal y como ocurría en el problema 1D.

Un procedimiento más riguroso se basa en utilizar la expresión de Galerkin perturbada (ver ec. (4.37)) con \hat{r} definido ahora por

$$\hat{r} = -\mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} + \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} + Q \quad (4.86)$$

La selección de diferentes funciones de perturbación P conduce a los métodos siguientes:

Método	Función de perturbación
--------	-------------------------

Petrov-Galerkin contracorriente (SUPG)	$P := -\mathbf{u}^T \nabla$ (4.87a)
--	--

Mínimos cuadrados de Galerkin (MCG)	$P := -\mathbf{u}^T \nabla + \nabla^T \mathbf{D} \nabla$ (4.87b)
-------------------------------------	---

Multiescalas	$P := -\mathbf{u}^T \nabla - \nabla^T \mathbf{D} \nabla$ (4.87c)
--------------	---

El parámetro de tiempo intrínseco τ asociado a la ec. (4.37) se evalúa ahora como $\tau = \frac{\alpha l^{(e)}}{2|\mathbf{u}|}$, siendo $l^{(e)}$ una dimensión característica del elemento, obtenida como se escribe más arriba.

La expresión del parámetro de estabilización α en todos estos métodos se basa en una extensión heurística del valor óptimo para el problema 1D dado por la ec. (4.28) con $\gamma = \frac{|\mathbf{u}| l^{(e)}}{2k}$ y $k = (k_{\xi}^2 + k_{\eta}^2)^{1/2}$ para el problema anisótropo, donde k_{ξ} y k_{η} son las direcciones de conductividad principales.

Adviértase que el método SUPG añade una difusión artificial sólo a lo largo de las líneas de corriente. La expresión integral resultante es similar a la (4.85) con la única diferencia que la función de perturbación afecta ahora también los términos de conducción y de fuente (ver ec. (4.35)).

Los métodos anteriores funcionan bien en problemas en que la dirección del gradiente de ϕ se alinea con la del vector \mathbf{u} . No obstante, en problemas en que aparecen fuertes gradientes de ϕ en direcciones diferentes del vector \mathbf{u} , es necesario introducir una estabilización adicional, denominada comúnmente *difusión transversal*. Esta difusión es generalmente de naturaleza no lineal y su expresión depende del gradiente de ϕ y del residuo de la solución.

En el apartado siguiente veremos como el método de cálculo finitesimal en problemas 2D y 3D tiene en cuenta, de manera natural, ese efecto estabilizador transversal.

4.5 MÉTODO DE CÁLCULO FINITESIMAL EN VARIAS DIMENSIONES

Las ecuaciones del problema de convección-conducción del calor estacionario, utilizando la teoría de cálculo finitesimal explicada en el Apartado 4.3 para el caso 1D, se escriben para el caso multidimensional como [37–42]

$$r - \frac{1}{2}\mathbf{h}^T \nabla r = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (4.88a)$$

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en } \Gamma_p \quad (4.88b)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q}_n - \frac{1}{2}\mathbf{h}^T \mathbf{n} r = 0 \quad \text{en } \Gamma_q \quad (4.88c)$$

La ec. (4.88a) se obtiene estableciendo el balance de flujos convectivo y conductivo en un dominio prismático de dimensiones finitas situado en el interior del dominio de análisis Ω y reteniendo términos de los desarrollos de Taylor de un orden superior a los de la teoría infinitesimal. Por otra parte, la ec. (4.88c) se obtiene estableciendo el balance de flujos en un dominio de tamaño finito próximo al contorno de Neumann Γ_q . El vector \mathbf{h} en (4.88a) y (4.88c) se denomina *vector de longitud característica* y sus componentes son los lados del dominio prismático donde se establece el balance de flujos en Ω . Así

$$1\text{D: } \mathbf{h} = [h], \quad 2\text{D: } \mathbf{h} = \begin{Bmatrix} h_x \\ h_y \end{Bmatrix}, \quad 3\text{D: } \mathbf{h} = \begin{Bmatrix} h_x \\ h_y \\ h_z \end{Bmatrix} \quad (4.89)$$

Los detalles de la obtención de las ecs. (4.88) pueden encontrarse en [37,43].

Adviértase que para $\mathbf{h} = 0$ se recupera la forma clásica de las ecuaciones de balance para el caso infinitesimal.

La aplicación del método de Galerkin y el MEF a las ecs. (4.88) conduce a la siguiente expresión integral (después de integrar por partes el término que afecta a $\mathbf{h}^T \nabla r$)

$$\int_{\Omega} N_i \hat{r} d\Omega - \int_{\Gamma_q} N_i (\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q}_n) d\Gamma + \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla N_i \hat{r} d\Omega = 0 \quad (4.90)$$

La función de perturbación P de la ec. (4.37) se identifica en este caso con $P := -\frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla$.

Un caso particular de la ec. (4.90) de gran interés, es escoger el vector \mathbf{h} alineado con el vector velocidad, es decir $\mathbf{h} = \frac{h}{|\mathbf{u}|} \mathbf{u}$ donde h es una longitud característica.

Haciendo ahora $h = 2l^{(e)}$ donde $l^{(e)}$ es una dimensión típica de cada elemento, la función de perturbación P coincide exactamente con la definida para el método SUPG (ec. (4.87a)) y el parámetro de tiempo intrínseco se obtiene por

$$\tau = \frac{h}{2|\mathbf{u}|} = \frac{\alpha l^{(e)}}{2|\mathbf{u}|} \quad (4.91)$$

Se deduce por tanto que el método SUPG es un caso particular de la formulación de cálculo finitesimal descrita, deducido escogiendo el vector \mathbf{h} en la dirección de \mathbf{u} . Este remarcable resultado indica que el método de cálculo finitesimal es un procedimiento riguroso y consistente para explicar el origen de los diversos métodos de estabilización propuestos en el pasado, de forma más o menos heurística.

4.5.1 El papel de la difusión transversal estabilizadora

La hipótesis de que el vector \mathbf{h} es paralelo a \mathbf{u} es una *simplificación* que elimina cualquier efecto de estabilización transversal en presencia de altos gradientes de ϕ en direcciones no coincidentes con las de la velocidad. La típica estrategia para eliminar las oscilaciones de ϕ en estos casos utilizando el método SUPG (e incluso los métodos de MCG y de multiescala) es introducir un término de difusión adicional (denominada difusión transversal) proporcional al gradiente de ϕ y al residuo de la solución numérica [26,44–46].

El efecto estabilizador de esta difusión transversal puede reproducirse de manera natural en la formulación de cálculo finitesimal, simplemente abandonando la hipótesis de que \mathbf{h} es paralelo a \mathbf{u} y dejando las componentes de \mathbf{h} como parámetros libres.

En el apartado siguiente explicaremos un procedimiento para calcular dichos parámetros.

4.5.2 Cálculo de los parámetros de estabilización en el método de cálculo finitesimal

Consideremos la solución por elementos finitos del problema de convección-conducción. El residuo de la solución numérica en cada punto es

$$\hat{r} - \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla \hat{r} = r_\Omega \quad \text{en } \Omega \quad (4.92)$$

donde $\hat{r} = r(\hat{\phi})$ y $\hat{\phi}$ es la solución (aproximada) obtenida por el MEF.

Definiendo ahora el residuo medio de la solución numérica sobre un elemento por

$$r^{(e)} = \frac{1}{\Omega^{(e)}} \int_{\Omega^{(e)}} \hat{r} d\Omega \quad (4.93)$$

Sustituyendo la ec. (4.93) en (4.92) se obtiene

$$r^{(e)} = \hat{r}^{(e)} - \left(\frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla \hat{r} \right)^{(e)} \quad (4.94)$$

donde

$$r^{(e)} := r_{\Omega^{(e)}} \quad (4.95)$$

Para mayor simplicidad supondremos que el vector de longitud característica es constante sobre cada elemento, es decir $\mathbf{h} = \mathbf{h}^{(e)}$. Con esta hipótesis la ec. (4.94) puede simplificarse a

$$r^{(e)} = \hat{r}^{(e)} - \frac{1}{2} \left[\mathbf{h}^{(e)} \right]^T (\nabla \hat{r})^{(e)} \quad (4.96)$$

Expresemos ahora el vector \mathbf{h} en función de los componentes a lo largo del vector velocidad \mathbf{u} y una dirección arbitraria \mathbf{v} como

$$\mathbf{h} = h_s \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|} + h_t \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} \quad (4.97)$$

donde h_s y h_t son las longitudes características a lo largo de las líneas de corriente y transversal, respectivamente.

Se han encontrado excelentes resultados tomando $\mathbf{v} = \nabla \phi$ siguiendo las ideas de otros esquemas de captura de discontinuidades [44–46].

Sustituyendo la ec. (4.97) en (4.96) se obtiene

$$r^{(e)} = \hat{r}^{(e)} - \frac{1}{2} \left[h_s \frac{\mathbf{u}^T}{|\mathbf{u}|} + h_t \frac{\mathbf{v}^T}{|\mathbf{v}|} \right]^{(e)} (\nabla \hat{r})^{(e)} \quad (4.98)$$

Las longitudes características h_s y h_t se expresan ahora como una proporción de una dimensión típica del elemento $l^{(e)}$

$$h_s^{(e)} = \alpha_s^{(e)} l^{(e)} \quad , \quad h_t^{(e)} = \alpha_t^{(e)} l^{(e)} \quad (4.99)$$

donde $\alpha_s^{(e)}$ y $\alpha_t^{(e)}$ son los parámetros de estabilización a lo largo de las líneas de corriente y transversal, respectivamente. En la práctica se toma $l^{(e)} = [\Omega^{(e)}]^{1/d}$ con $d = 1, 2, 3$ para problemas 1D, 2D y 3D, respectivamente.

Claramente, para $\alpha_t^{(e)} = 0$ se reproduce el efecto de difusión a lo largo de las líneas de corriente, típico del método SUPG.

Consideremos ahora que se ha obtenido una solución numérica mejorada para una malla de elementos finita dada. Esto puede obtenerse proyectando sobre la malla original una solución numérica mejorada obtenida mediante alisado local/global de las derivadas, o por recuperación superconvergente de las derivadas, etc. [6,47,48]. Si $r_1^{(e)}$ y $r_2^{(e)}$ representan respectivamente los residuos elementales de las soluciones numéricas original y mejorada para una cierta malla, es obvio que en esta última solución el error residual debe reducirse y

$$r_1^{(e)} - r_2^{(e)} \geq 0 \quad (4.100)$$

Claramente en el caso límite de la solución exacta $r_1^{(e)} = r_2^{(e)} = 0$.

La ec. (4.100) supone que $r_1^{(e)}$ es positivo. Si fuera negativo, debe invertirse el signo en la desigualdad.

Combinando las ecs. (4.98), (4.99) y (4.100) se obtiene

$$\left[\alpha_s \frac{\mathbf{u}^T}{|\mathbf{u}|} + \alpha_t \frac{\mathbf{v}^T}{|\mathbf{v}|} \right]^{(e)} (\nabla \hat{r}_2^{(e)} - \nabla \hat{r}_1^{(e)}) \geq \frac{2}{l^{(e)}} (\hat{r}_2^{(e)} - \hat{r}_1^{(e)}) \quad (4.101)$$

La ec. (4.101) es la base para el cálculo iterativo de los parámetros de estabilización. como se muestra a continuación.

Esquema de estabilización alfa-adaptable

Seguidamente se describe un esquema que puede utilizarse para tener una solución estable de forma adaptable [39].

1. Resolver el problema estabilizado definido por las ecs. (4.89) utilizando el MEF con un valor de prueba para los parámetros de estabilización. Por ejemplo

$$\alpha_s^{(e)} = {}^o\alpha_s^{(e)} \quad , \quad \alpha_t^{(e)} = {}^o\alpha_t^{(e)} \quad (4.102)$$

2. Recuperar un campo de derivadas mejorado. Evaluar $\hat{r}_1^{(e)}$, $\hat{r}_2^{(e)}$, $\nabla r_1^{(e)}$ y $\nabla r_2^{(e)}$.
3. Calcular un valor mejorado de parámetro de estabilización transversal $\alpha_s^{(e)}$ utilizando la ec. (4.101)

$${}^1\alpha_s^{(e)} = \frac{|\mathbf{u}|}{\mathbf{u}^T (\nabla \hat{r}_2^{(e)} - \nabla \hat{r}_1^{(e)})} \left[\frac{2}{l^{(e)}} (\hat{r}_2^{(e)} - \hat{r}_1^{(e)}) - \alpha_t^{(e)} \frac{\mathbf{v}^T}{|\mathbf{v}|} (\nabla \hat{r}_2^{(e)} - \nabla \hat{r}_1^{(e)}) \right] \quad (4.103)$$

4. Repetir las etapas (1)-(3) hasta que se obtiene convergencia para el valor de $\alpha_s^{(e)}$, manteniendo $\alpha_t^{(e)}$ constante.

5. Repetir las etapas (1)-(4) para calcular $\alpha_t^{(e)}$ manteniendo $\alpha_s^{(e)}$ constante e igual el último valor encontrado. En la primera iteración conviene utilizar $\alpha_t^{(e)} = {}^\circ\alpha_t^{(e)} + \epsilon$, donde ϵ es un pequeño valor. El valor actualizado de $\alpha_t^{(e)}$ se calcula por

$${}_i\alpha_t^{(e)} = \frac{|\mathbf{v}|}{\mathbf{v}^T(\nabla\hat{r}_2^{(e)} - \nabla\hat{r}_1^{(e)})} \left[\frac{2}{l^{(e)}}(\hat{r}_2^{(e)} - \hat{r}_1^{(e)}) - \alpha_s^{(e)} \frac{\mathbf{u}^T}{|\mathbf{u}|}(\nabla\hat{r}_2^{(e)} - \nabla\hat{r}_1^{(e)}) \right] \quad (4.104)$$

6. Una vez encontrado $\alpha_t^{(e)}$, pueden repetirse las etapas (1)-(5) para obtener valores mejorados de $\alpha_s^{(e)}$ y $\alpha_t^{(e)}$. Este nuevo proceso iterativo no suele efectuarse en la práctica.

En la referencia [39] se explica como mejorar el proceso iterativo anterior para tratar elementos próximos al contorno.

Adviértase que tomando $\alpha_t^{(e)} = 0$ el proceso iterativo anterior proporciona el valor del parámetro de estabilización contracorriente típico del método SUPG. No obstante, en problemas con altos gradientes en direcciones diferentes de vector velocidad, es esencial tener en cuenta el efecto del término en que interviene $\alpha_t^{(e)}$ para obtener una solución estable.

El número de iteraciones en el proceso adaptable anterior se reduce sustancialmente si los valores iniciales de $\alpha_s^{(e)}$ y $\alpha_t^{(e)}$ no difieren mucho de los valores finales. Esto puede asegurarse tomando para $\alpha_s^{(e)}$ el valor estándar obtenido por simple extrapolación del caso 1D (ver ec. (4.28)). Por otra parte, es usual tomar ${}^\circ\alpha_t^{(e)} = 0$ y $\mathbf{v} = \phi$.

4.6 EJEMPLOS

4.6.1 Ejemplos de problemas de convección-conducción del calor 1D resueltos con el método de cálculo finitesimal

La forma particular de la ec. (4.101) para el problema de convección-conducción 1D es (advirtiendo que en este caso $\alpha_t^{(e)} = 0$)

$$\alpha^{(e)} \geq \frac{2}{l^{(e)}} (\hat{r}_2^{(e)} - \hat{r}_1^{(e)}) \left[\left(\frac{d\hat{r}_2}{dx} \right)^{(e)} - \left(\frac{d\hat{r}_1}{dx} \right)^{(e)} \right]^{-1} \quad (4.105)$$

El signo de igualdad en la ec. (4.105) proporciona el valor crítico del parámetro de estabilización que garantiza el no crecimiento del error numérico. A continuación se comprobará la precisión de la expresión anterior con un sencillo ejemplo.

Consideremos la solución por el MEF del problema 1D siguiente

$$-u \frac{d\phi}{dx} + k \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0, \quad 0 \leq x \leq l \quad (4.106)$$

con las condiciones de contorno de Dirichlet

$$\begin{aligned}\phi &= 0 & \text{sobre } x=0 \\ \phi &= 1 & \text{sobre } x=l\end{aligned}\quad (4.107)$$

Obtendremos la solución del MEF con elementos finitos de dos nodos. Para una malla uniforme, el valor medio del residuo y de su derivada sobre un elemento con nodos i y $i+1$ viene dado por

$$\hat{r}_1^{(e)} = -\frac{u}{l^{(e)}}(\phi_{i+1} - \phi_i) \quad \text{y} \quad \left(\frac{d\hat{r}_1}{dx}\right)^{(e)} = 0 \quad (4.108)$$

La solución mejorada se obtiene ahora por un simple alisado de la derivada $\frac{d\phi}{dx}$ en los nodos. El residuo elemental para la solución mejorada se expresa por

$$\hat{r}_2^{(e)} = -\frac{u}{2}(\hat{\phi}'_i + \hat{\phi}'_{i+1}) + \frac{k}{l^{(e)}}(\hat{\phi}'_{i+1} - \hat{\phi}'_i) \quad (4.109)$$

donde $\hat{\phi}'_i = \left(\frac{d\hat{\phi}}{dx}\right)_i$. Operando se encuentra

$$\hat{r}_2^{(e)} = -\frac{u}{4l^{(e)}}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1} + \phi_{i+2} - \phi_i) + \frac{k}{2(l^{(e)})^2}(\phi_{i+2} - \phi_i - \phi_{i+1} + \phi_{i-1}) \quad (4.110)$$

Un proceso similar conduce a (prescindiendo del término de derivada tercera de ϕ)

$$\left(\frac{d\hat{r}_2}{dx}\right)^{(e)} = -u\frac{d^2\hat{\phi}}{dx^2} = -\frac{u}{2(l^{(e)})^2}[\phi_{i+2} - \phi_i - \phi_{i+1} + \phi_{i-1}] \quad (4.111)$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en (4.105) se obtiene el parámetro de estabilización crítico por

$$\alpha^{(e)} \geq \left[\frac{\phi_{i+2} - 3\phi_{i+1} + 3\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+2} - \phi_{i+1} - \phi_i + \phi_{i-1}} - \frac{1}{\gamma} \right] \quad (4.112)$$

donde $\gamma = \frac{ul^{(e)}}{2k}$ es el número de Peclet elemental.

Puede comprobarse que el valor de $\alpha^{(e)}$ obtenido de la ec. (4.112) coincide con la expresión analítica usualmente utilizada en la práctica. Para ello sustituyamos en la ec. (4.112) el valor general de ϕ_i de la solución numérica de este problema que se expresa por

$$\phi_i = A + B \left[\frac{1 + \gamma(\alpha + 1)}{1 + \gamma(\alpha - 1)} \right]^i \quad (4.113)$$

donde A y B son constantes. Después de sencillas operaciones algebraicas se deduce de (4.112)

$$\alpha^{(e)} \geq 1 - \frac{1}{\gamma} \quad (4.114)$$

que coincide con el valor crítico estándar del parámetro de estabilización (ver ec. (4.25)).

En las Figuras 4.7 y 4.8 se muestran dos aplicaciones prácticas del proceso adaptable (iterativo) para calcular α explicado en el apartado anterior.

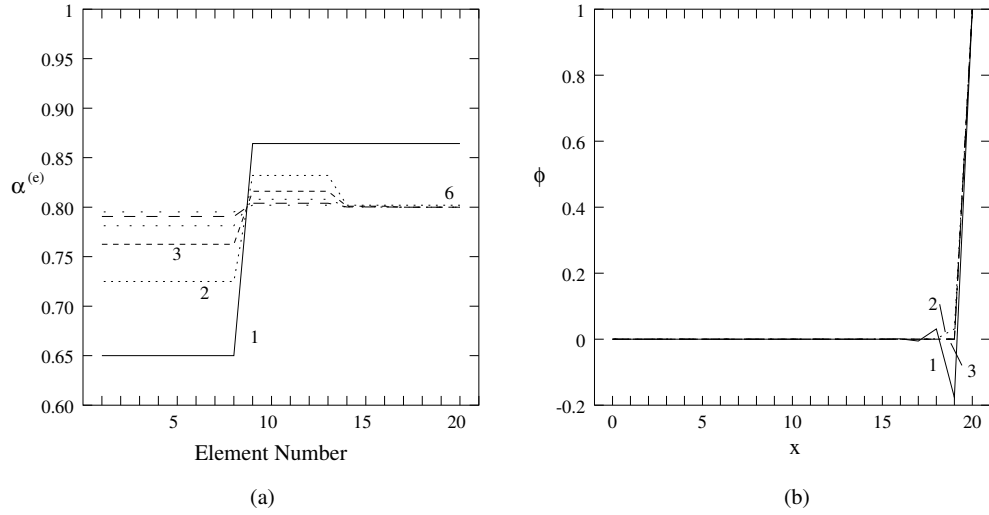


Figura 4.7: Problema de convección-conducción unidimensional. Malla de 20 elementos lineales, $\gamma = 5$. a) Convergencia del valor crítico del parámetro de estabilización elemental $\alpha^{(e)}$; b) Convergencia de distribución de ϕ

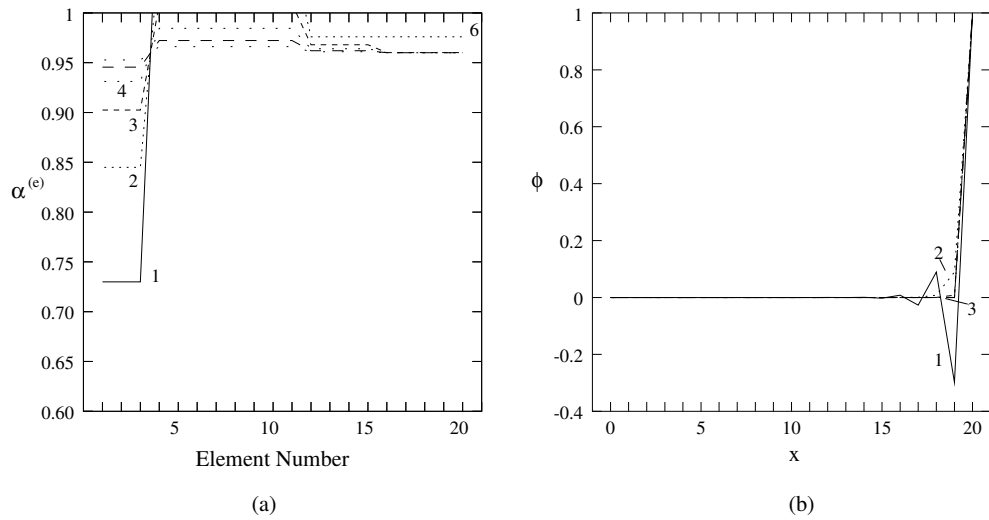


Figura 4.8: Problema de convección-conducción unidimensional. Malla de 20 elementos lineales, $\gamma = 25$. a) Convergencia del valor crítico del parámetro de estabilización elemental $\alpha^{(e)}$; b) Convergencia de distribución de ϕ

En el primer caso se resuelve el problema definido por las ecs. (4.106) y (4.107) para $\gamma = 5$ con una malla de 20 elementos lineales. Se toma un valor inicial $\alpha = 5$ para todos los elementos. La Figura 4.7a muestra la convergencia de la solución para cálculo de $\alpha^{(e)}$. Se advierte que se obtiene el valor crítico $\alpha^{(e)} = 0,8$ en toda la malla después de algunas iteraciones. En la Figura 4.7b se muestra la convergencia de la distribución de ϕ que coincide con la solución “exacta” después de tres iteraciones. Adviértase la solución inestable obtenida en la primera iteración, con valores de ϕ negativos en las proximidades del extremo derecho del dominio.

En la Figura 4.8 se muestran resultados para el mismo problema obtenidos con $\gamma = 25$. Como en el caso anterior, se obtiene una buena solución para ϕ después de dos iteraciones. Para converger al valor de $\alpha^{(e)}$ correcto en toda la malla se necesitan, no obstante, siete iteraciones.

Es interesante advertir que en ambos problemas para obtener una solución estable basta con utilizar una buena aproximación para $\alpha^{(e)}$ en la vecindad de la zona de altos gradientes (el extremo derecho), lo que sucede en dos o tres iteraciones [42].

4.6.2 Problemas de convección-conducción bidimensionales resueltos con el método de cálculo finitesimal

En los problemas 2D que se muestran a continuación se han utilizado elementos rectangulares de cuatro nodos. El gradiente de ϕ se ha calculado en los puntos de Gauss 2×2 en cada elemento. El campo de primeras derivadas mejoradas se calcula proyectando los valores de los puntos de Gauss a los nodos utilizando una interpolación bilineal y luego calculando la media de los valores nodales discontinuos que contribuyen al nodo cada uno de los elementos adyacentes.

Problema de convección-conducción con fuente nula, velocidad diagonal y condiciones de contorno uniformes de Dirichlet

El primer ejemplo es la solución del problema estándar de convección-conducción con $Q = 0$ en un dominio cuadrado de lado unidad con

$$k_x = k_y = 1, \quad \mathbf{u} = [1, 1]^T, \quad \nu = 1 \times 10^{10}, \quad Q = 0 \quad (4.115)$$

Se suponen las siguientes condiciones de Dirichlet:

$$\phi = 0 \quad \text{a lo largo de los lados} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad y = 0$$

$$\phi = 100 \quad \text{a lo largo del lado} \quad x = 1$$

$$\bar{q}_n = 0 \quad \text{a lo largo del lado} \quad y = 1$$

La solución esperada en este caso es una distribución uniforme de $\phi = 0$ sobre todo el cuadrado, a excepción de la zona próxima al lado $y = 1$ donde se forma una capa límite.

El dominio se discretiza con una malla uniforme de 400 cuadriláteros de cuatro nodos, como se muestra en la Figura 4.9. Se tienen en cuenta efectos de estabilización transversal tomando $\mathbf{v} = \nabla\phi$ en la ec. (4.97). Se ha escogido $\circ\alpha_s^{(e)} = \circ\alpha_t^{(e)} = 0$ en todos los elementos.

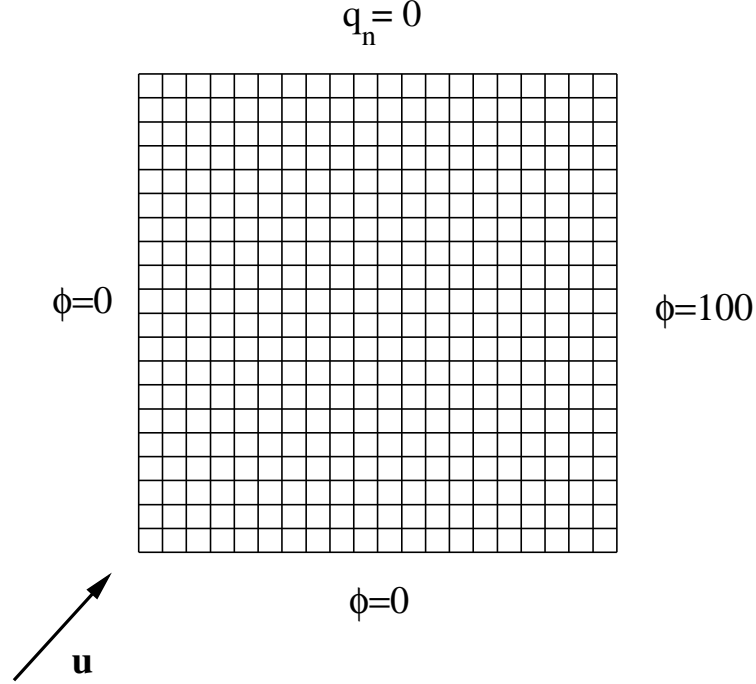


Figura 4.9: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con velocidad diagonal. Malla de 400 cuadriláteros lineales de 4 nodos

La Figura 4.10 muestra la distribución inicial de ϕ para $\alpha_s^{(e)} = \alpha_t^{(e)} = 0$ (solución de Galerkin). Nótese las grandes oscilaciones en la solución, como era de esperar. En la Figura 4.11 se muestra la solución final convergida después de siete iteraciones. Puede verse que se captura la capa límite en las proximidades del lado $y = 1$ sin oscilaciones. Por el contrario, la solución es oscilatoria (inestable) en esa zona, si se hace nulo el parámetro de estabilización transversal $\alpha_t^{(e)}$, lo que conduce a la solución del método SUPG estándar. En la Figura 4.12 se muestra la comparación de las distribuciones de ϕ a lo largo de la línea entre $y = 0,5$ obtenidas con el método estabilizado completo (incluyendo los efectos de $\alpha_s^{(e)}$ y $\alpha_t^{(e)}$ y con el método SUPG ($\alpha_t^{(e)} = 0$)).

En la Figura 4.13 se muestra finalmente la distribución del vector de longitud característica \mathbf{h} dado por la ec. (4.97). Se aprecia que en la parte central del dominio los vectores \mathbf{h} están alineados con la dirección del vector velocidad (es decir, $h_t = 0$), mientras que en la proximidad de los contornos el efecto del parámetro de estabilización transversal h_t conduce a un cambio importante en la dirección de \mathbf{h} [43].

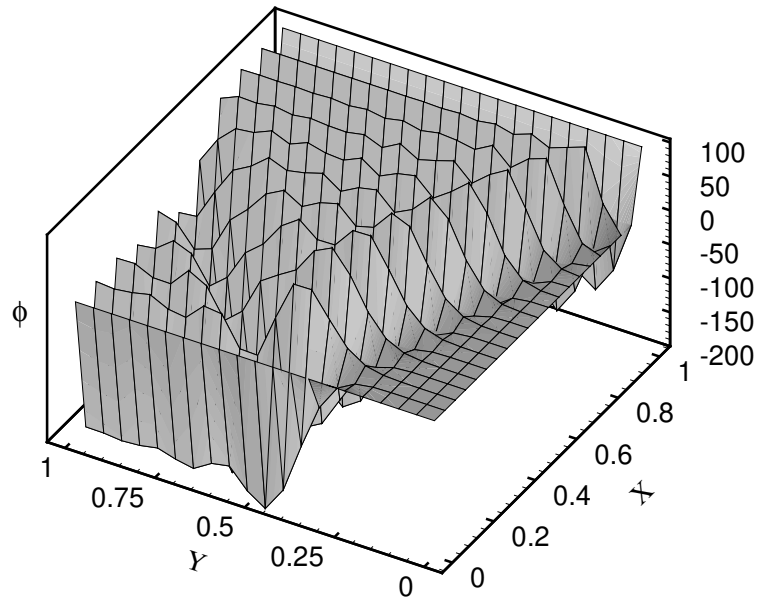


Figura 4.10: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con velocidad diagonal. Distribución oscilatoria inicial de ϕ para $\alpha_s^{(e)} = \alpha_t^{(e)} = 0$

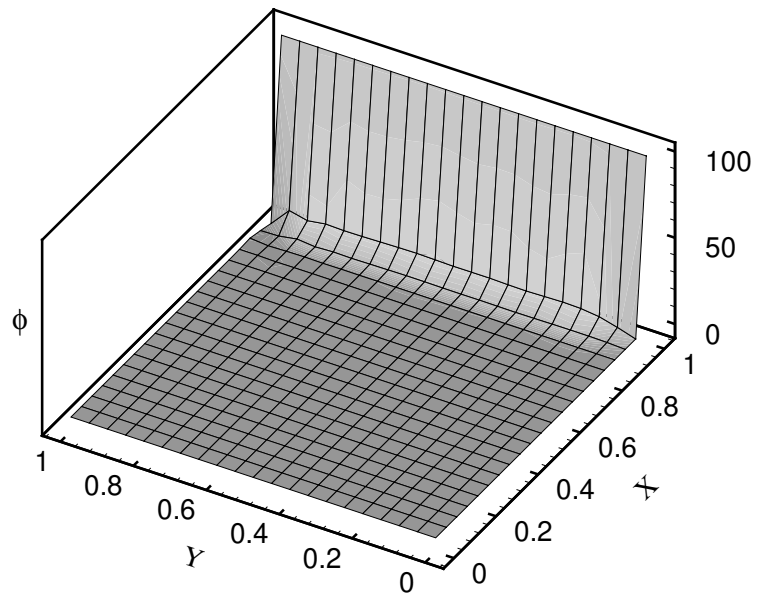


Figura 4.11: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con velocidad diagonal. Distribución final de ϕ después de siete iteraciones

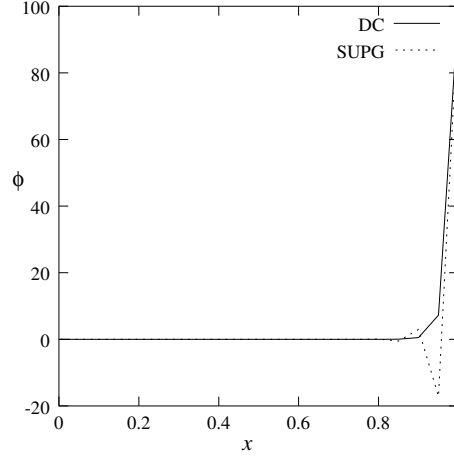


Figura 4.12: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con velocidad diagonal. Distribución de ϕ a lo largo de la línea central obtenida con la formulación estabilizada completa incluyendo términos de captura de discontinuidades ($\alpha_t \neq 0$) y la formulación SUPG ($\alpha_t = 0$)

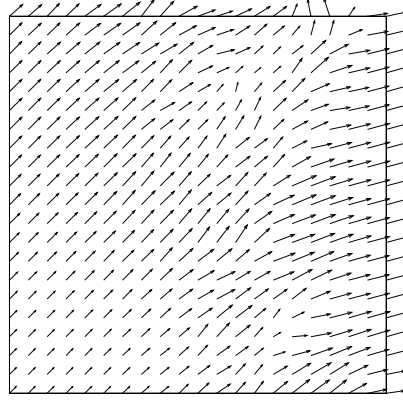


Figura 4.13: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con velocidad diagonal. Distribución final del vector de longitud característica \mathbf{h}

4.6.3 Problema de convección-conducción del calor bidimensional con fuente nula y condición de contorno de Dirichlet no uniforme

Se resuelve ahora la ecuación de convección-conducción del calor con las condiciones siguientes

$$\Omega = \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[\times] - \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right], \quad \mathbf{u} = [\cos \theta, -\sin \theta]^T \quad (4.116)$$

$$k_x = k_y = 10^{-6}, \quad Q(x, y) = 0, \quad \phi(x, y) = \begin{cases} 100 & \text{si } (x, y) \in \Gamma_{\phi_1} \\ 0 & \text{si } (x, y) \in \Gamma_{\phi_2} \end{cases} \quad (4.117)$$

El problema se resuelve utilizando una malla estructurada de 576 elementos cuadriláteros lineales de cuatro nodos (Figura 4.14). Se toma un valor de \mathbf{u} definido por $\tan \theta = 2$. De nuevo se escoge $\mathbf{v} = \nabla \phi$ y los valores $\alpha_s^{(e)} = \alpha_t^{(e)} = 0$ en todos los elementos.

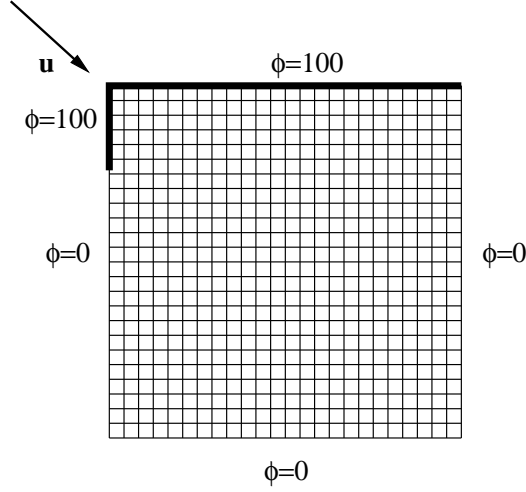


Figura 4.14: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con condición de Dirichlet no uniforme. Malla de 576 elementos cuadriláteros lineales de cuatro nodos

En la Figura 4.15 se muestra la distribución oscilatoria de ϕ obtenida para la primera solución con los parámetros de estabilización nulos. La distribución final de ϕ después de siete iteraciones se muestra en la Figura 4.16. Se aprecia que se capturan sin prácticamente oscilaciones tanto las capas límite cerca de los contornos, como la zona de alto gradiente en el interior. No es así el caso si se utiliza la formulación SUPG ($\alpha_t^{(e)} = 0$) obteniéndose una solución inestable (oscilatoria) cerca del lado $x = 1$ (Figura 4.17).

La Figura 4.18 muestra la distribución del parámetro de estabilización \mathbf{h} . Se advierte que la dirección de \mathbf{h} en la zona suave de la solución está alineada con la de la velocidad \mathbf{u} , mientras que \mathbf{h} cambia de dirección al acercarse a las zonas de altos gradientes de ϕ .

4.7 ANÁLISIS TRANSITORIO DE PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-CONDUCCIÓN DEL CALOR

En este apartado abordamos la solución de la ecuación de convección-conducción de calor transitoria definida por

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}^T \mathbf{D} \nabla \phi - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi - Q = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (4.118)$$

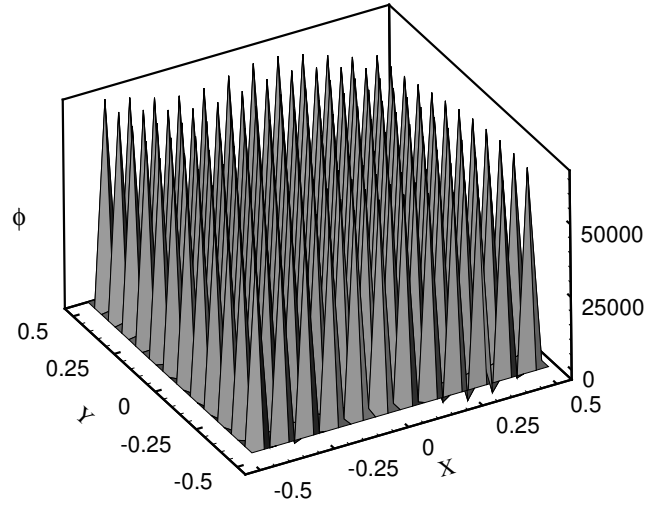


Figura 4.15: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con condición de Dirichlet no uniforme. Distribución oscilatoria de ϕ inicial para $\alpha_s^{(e)} = \alpha_t^{(e)} = 0$

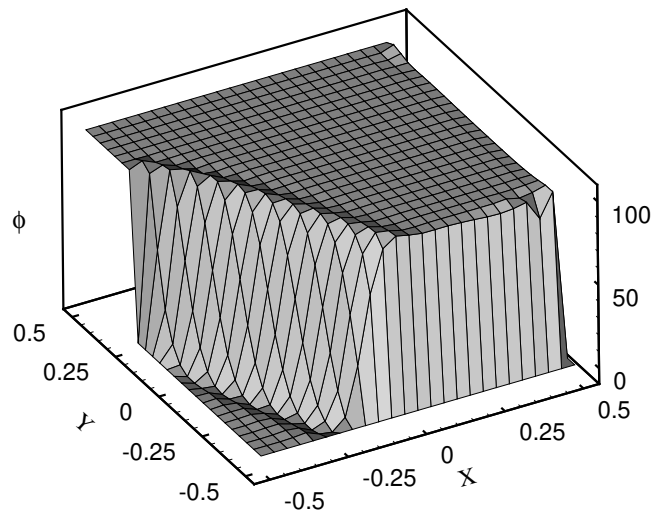


Figura 4.16: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con condición de Dirichlet no uniforme. Distribución final de ϕ después de siete iteraciones

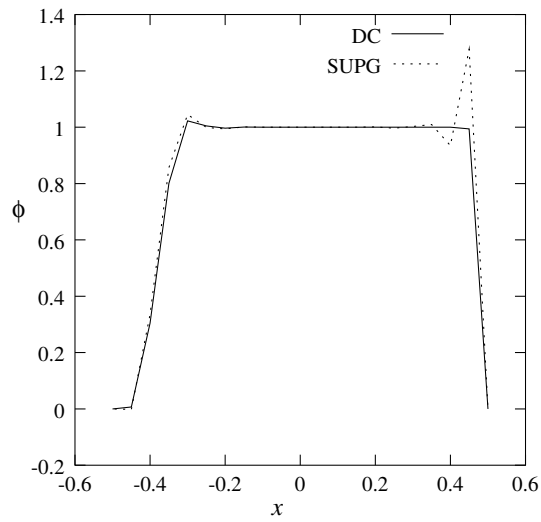


Figura 4.17: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con condición de Dirichlet no uniforme. Distribución de ϕ a lo largo de la línea central obtenida con la formulación estabilizada completa incluyendo términos de captura de discontinuidades ($\alpha_t \neq 0$) y la formulación SUPG ($\alpha_t = 0$)

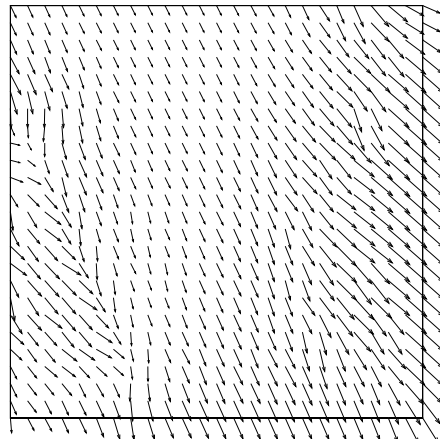


Figura 4.18: Problema de convección-conducción de calor bidimensional con condición de Dirichlet no uniforme. Distribución final del vector de longitud característica \mathbf{h}

Con las condiciones de contorno

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en} \quad \Omega_\phi \quad (4.119)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_q \quad (4.120)$$

y la condición inicial

$$\phi(x, y, z, 0) = \phi_0 \quad (4.121)$$

4.7.1 Discretización en el espacio y el tiempo

Consideremos en primer lugar la discretización en el espacio. Para ello, haremos uso de la formulación de cálculo finitesimal descrita en el Apartado 4.5. Así estableciendo las ecuaciones de balance en un dominio de tamaño finito y reteniendo términos de los desarrollos en serie de Taylor de un orden mayor al usual en la teoría infinitesimal se obtienen las ecuaciones de gobierno modificadas que se escriben por

$$r - \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla r = 0 \quad \text{en} \quad \Omega \quad (4.122)$$

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_\phi \quad (4.123)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} - \frac{1}{2} \mathbf{n}^T \mathbf{h} r = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_q \quad (4.124)$$

donde

$$r = \rho c \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}^T \nabla \phi \right) - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi - Q = 0 \quad (4.125)$$

La condición inicial sigue siendo la ec.(3.4).

En la obtención de la eq. (4.122) se han despreciado términos de mayor orden en las derivadas temporales. Una obtención más precisa incluyendo dichas derivadas puede encontrarse en [42]. La forma de las ecs. (4.122-4.124) es, sin embargo, suficiente para resolver problemas de interés práctico.

La aproximación por el MEF se escribe en la forma usual en problemas transitorios

$$\phi \cong \hat{\phi}(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n N_i(x, y, z) \hat{\phi}_i(t) \quad (4.126)$$

Aplicando el método de residuos ponderados de Galerkin a las ecs. (4.122)-(4.124) se obtiene, tras realizar las integraciones por partes usuales, la forma integral siguiente

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[N_i \left(\rho c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} + \mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} \right) + \nabla^T N_i \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} \right] d\Omega - \int_{\Omega} N_i Q d\Omega + \\ & + \sum_e \int_{\Omega^{(e)}} \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla N_i \left[\rho c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} + \mathbf{u}^T \nabla \hat{\phi} - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \hat{\phi} - Q \right] d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.127)$$

Sustituyendo (4.126) en (4.127) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas

$$\mathbf{C} \frac{d\mathbf{a}}{dt} + \mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (4.128)$$

con

$$\mathbf{a} = [\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \dots, \hat{\phi}_N]^T \quad (4.129)$$

$$C_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \left(N_i + \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla N_i \right) \rho c N_i d\Omega \quad (4.130)$$

$$K_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \left(N_i \mathbf{u}^T \nabla N_j + \nabla^T N_i \mathbf{D} \nabla N_j \right) d\Omega + \quad (4.131)$$

$$+ \int_{\Omega^{(e)}} \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla N_i \left(\mathbf{u}^T \nabla N_j - \nabla^T \mathbf{D} \nabla N_j \right) d\Omega$$

$$f_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i Q d\Omega + \int_{\Omega^{(e)}} \frac{1}{2} \mathbf{h}^T \nabla N_i Q d\Omega \quad (4.132)$$

En la práctica es usual de precisar el término en que interviene la longitud característica \mathbf{h} en la matriz \mathbf{C} y operar con la expresión diagonal de \mathbf{C} deducida según lo explicado en el Capítulo 3. Se deduce también que el término de conducción en la segunda integral de (4.131) es nulo si se utilizan elementos lineales. Asimismo, la segunda integral de (4.132) es nula para Q constante.

Para la integración en el tiempo haremos uso del esquema trapezoidal estudiado en el Apartado 3.5.1. La ecuación matricial resultante se escribe como

$$(\mathbf{C} + \Delta t \theta \mathbf{K}) \mathbf{a}^{n+1} = \Delta t (\theta \mathbf{f}^{n+1} + (1 - \theta) \mathbf{f}^n) + [\mathbf{C} - \Delta t (1 - \theta) \mathbf{K}] \mathbf{a}^n \quad (4.133)$$

Recordemos que el algoritmo anterior es incondicionalmente estable (y por tanto convergente) para $\theta \geq 1/2$. El caso $\theta = 0$ (algoritmo de Euler hacia adelante) es muy interesante, pues aunque su estabilidad está condicionada y exige utilizar incrementos pequeños, proporciona un esquema explícito cuando la matriz \mathbf{C} es diagonal (\mathbf{C}_D).

El esquema explícito se escribe por tanto como (con $\mathbf{C} \equiv \mathbf{C}_D$)

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \Delta t \mathbf{C}_D^{-1} [\mathbf{f}^n - \mathbf{K} \mathbf{a}^n] \quad (4.134)$$

Un estudio de la estabilidad de este esquema para elementos lineales unidimensionales conduce a la condición siguiente (ver ref. [26] para los detalles)

$$c \leq \frac{\gamma}{1 + \alpha \gamma} \quad \text{con} \quad \alpha \geq 1 - \frac{1}{\gamma} \quad (4.135)$$

$$c \leq \frac{1}{\gamma} + \alpha \quad \text{para} \quad \alpha < 1 - \frac{1}{\gamma} \quad (4.136)$$

donde $c = \frac{u\Delta t}{l(e)}$ es el número de Courant del elemento y α el parámetro de estabilidad espacial del problema 1D.

La condición (4.135) es la esencial para la estabilidad temporal e incluye la condición para el parámetro de estabilidad espacial α obtenida para el caso estacionario. La condición (4.136) indica que para $\alpha = 0$ (método de Galerkin) el algoritmo se hace incondicionalmente inestable para $\gamma \rightarrow \infty$, ya que en este caso la ec. (4.135) requiere $c = 0$ y, por tanto, $\Delta t = 0$,

Sustituyendo la expresión de α en c en (4.135) se deduce que

$$c \leq 1 \quad \text{en el denominado límite advectivo} \quad (\gamma \rightarrow \infty) \quad (4.137)$$

Por otra parte, de la expresión de c en (4.135) se obtiene

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{2k} \quad \text{en el límite difusivo} \quad (h \rightarrow 0) \quad (4.138)$$

La desigualdad (4.137) es la denominada condición CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) y proporciona el mejor valor superior de Δt que podemos esperar.

Los límites de estabilidad anteriores se utilizan también en problemas 2D y 3D. En lo que respecta al vector de longitud característica en estos casos, se suponen que son válidas las mismas expresiones que para el problema estacionario. En la práctica esto implica tomar

$$\mathbf{h} = h_s \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|} + h_t \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (4.139)$$

Las longitudes características a lo largo de las líneas de corriente h_s y transversal h_t se pueden calcular aplicando el algoritmo del Apartado 4.5.2 para cada paso de tiempo. En la práctica basta con realizar un par de iteraciones para obtener el valor mejorado de h_s y h_t .

Si se desea evitar el cálculo iterativo de h_s y h_t , pueden utilizarse los valores aproximados definidos por las ecs.(4.99).

4.7.2 Método de Taylor-Galerkin

La técnica de integración aplicado en el apartado anterior (similarmente al estudiado en el Apartado 4.5.2) se engloba dentro de los denominados algoritmos espaciales-temporales. Es decir, la solución se basa en realizar primeramente una aproximación en el espacio por medio del método de residuos ponderados, utilizando funciones de forma y de peso espaciales, y en segundo lugar aplicar un algoritmo de integración temporal a las ecuaciones resultantes de la discretización espacial.

El método de Taylor-Galerkin se basa en el procedimiento inverso. En primer lugar se efectúa la integración en el tiempo a partir de las ecuaciones de gobierno en forma diferencial y, tras ello, se aplica el método de residuos ponderados de Galerkin a las ecuaciones diferenciales que resultan de la aproximación temporal [6,26,49].

El método de Taylor-Galerkin es una popular técnica de integración temporal de sistema de ecuaciones de convección-difusión que introduce efectos

estabilizadores en la solución numérica. Describiremos sucintamente la base de dicho método y las analogías con la técnica de cálculo finitesimal.

Consideremos el desarrollo en series de Taylor de la solución en el tiempo. Utilizando diferencias hacia adelante se obtiene

$$\frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} = \phi'_n + \frac{\Delta t}{2} \phi''_n + O(\Delta t)^2 \quad (4.140)$$

En (4.140) ϕ_n indica el valor de ϕ en el tiempo t_n y $(\cdot)' = \frac{\partial \phi}{\partial t}$.

De la ec. (4.118) se deduce (suponiendo \mathbf{u} constante en el tiempo)

$$\rho c \phi'_n = -\rho c (\mathbf{u}^T \nabla \phi_n) + \nabla \mathbf{D} \nabla \phi_n + Q_n \quad (4.141)$$

y

$$\rho c \phi''_n = -\rho c \mathbf{u}^T \nabla \phi'_n + \nabla \mathbf{D} \nabla \phi'_n + Q'_n \quad (4.142)$$

Sustituyendo (4.141) y (4.142) en (4.140) se tiene

$$\rho c \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} = -\rho c \mathbf{u}^T \nabla \phi_n + \nabla \mathbf{D} \nabla \phi_n + Q_n + \frac{\Delta t}{2} (-\rho c \mathbf{u}^T \nabla \phi'_n + \nabla \mathbf{D} \nabla \phi'_n + Q'_n) \quad (4.143)$$

El ϕ'_n en el cuarto término del segundo miembro de (4.143) se aproxima por (4.141). Sin embargo, el ϕ'_n del quinto término se aproxima por $\frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t}$ para evitar derivadas terceras en el espacio. Agrupando los coeficientes de ϕ_{n+1} y ϕ_n se llega a

$$\begin{aligned} (\rho c - \frac{\Delta t}{2} \nabla^T \mathbf{D} \nabla) \phi_{n+1} = & \left[\rho c + \frac{\Delta t}{2} \nabla^T \mathbf{D} \nabla + \rho c \Delta t \mathbf{u}^T \nabla + \frac{\Delta t^2}{2} (\mathbf{u}^T \nabla)^2 \right] \phi_n + \\ & + \Delta t \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}^T \nabla \right) Q_n + \frac{\Delta t^2}{2} Q'_n \end{aligned} \quad (4.144)$$

donde

$$(\mathbf{u}^T \nabla)^2 = \mathbf{u}^T \nabla (\mathbf{u}^T \nabla) \quad (4.145)$$

Aplicando el método de residuos ponderados de Galerkin a la ec. (4.144) se obtiene el sistema siguiente

$$\left[\mathbf{C} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K} \right] \mathbf{a}_{n+1} = \left[\mathbf{C} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_d - \Delta t (\mathbf{K}_c + \bar{\mathbf{K}}_c) \right] \mathbf{a}_n + \bar{\mathbf{f}}_n \quad (4.146)$$

donde \mathbf{C} es la matriz de capacidad térmica usual,

$$K_{d_{ij}}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T N_i^{(e)} \mathbf{D} \nabla N_j^{(e)} d\Omega \quad (4.147)$$

es la matriz de conducción

$$K_{c_{ij}}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} \mathbf{u}^T \nabla N_j^{(e)} d\Omega \quad (4.148)$$

$$\bar{K}_{c_{ij}}^{(e)} = \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T N_i^{(e)} (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) \nabla^T N_j^{(e)} d\Omega \quad (4.149)$$

y

$$\bar{f}_{n_i} = \Delta t \int_{\Omega^{(e)}} N_i \left[\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}^T \nabla \right) Q_n + \frac{\Delta t}{2} Q'_n \right] d\Omega \quad (4.150)$$

Obsérvese que el proceso de discretización anterior produce un algoritmo tipo Crank-Nicolson ($\theta = \frac{1}{2}$) para los términos convectivos, mientras que el término de conducción se compone de la matriz de convección usual \mathbf{K}_c y una matriz de difusión “artificial” $\bar{\mathbf{K}}_c$. El valor de dicha difusión es $\bar{\mathbf{D}} = \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u}\mathbf{u}^T$.

Es fácil deducir que esta matriz de difusión artificial coincide con la que se obtiene con el método SUPG tomando $\mathbf{h} = \mathbf{u}\Delta t$ (o lo que es lo mismo $\alpha = c$). De ello se desprende que el método de Taylor-Galerkin no incluye efectos de estabilización transversales.

Pese a la aproximación del tipo de Crank-Nicholson para los términos de la ec. (4.146) sigue siendo explícita para la convección y, por tanto, es incondicionalmente estable. La estabilidad de dicha ecuación viene gobernada por el límite de Courant de la ec. (4.137).

Introduciendo la regla trapezoidal para aproximar los términos conductivos puede obtenerse una versión totalmente explícita del algoritmo de Taylor-Galerkin dada por

$$\mathbf{a}_{n+1} = \mathbf{a}_n + \Delta t \mathbf{C}_D^{-1} [\bar{\mathbf{f}}_n - \mathbf{K}_d - \mathbf{K}_c - \bar{\mathbf{K}}_c] \mathbf{a}_n \quad (4.151)$$

donde \mathbf{C}_D es la forma diagonal de \mathbf{C} .

El límite de estabilidad de este algoritmo viene dado también por la ec. (4.137). Haciendo $\alpha = c$ se deduce

$$c \leq \sqrt{\frac{1}{4\gamma^2} + 1} - \frac{1}{2\gamma} \quad (4.152)$$

El algoritmo de Taylor-Galerkin es análogo al denominado método de Características-Galerkin. En este método explicado con detalle en la ref. [50] se efectúa en primer lugar una aproximación temporal a lo largo de las líneas características de la solución. Tras ello se aplica el método de residuos ponderados de Galerkin a las ecuaciones resultantes. La forma final de las ecuaciones en el problema 1D es idéntica en ambos casos [6,26,50].

Capítulo 5

ANÁLISIS DE PROBLEMAS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR NO LINEALES

5.1 INTRODUCCIÓN

Estudiaremos en este capítulo la solución por el MEF de problemas de transmisión del calor no lineales. La no linealidad puede deberse a la dependencia de alguna de las propiedades del material con la temperatura (conductividad, calor específico, coeficiente de radiación, etc.), o bien a que alguno de los términos de fuente o absorción de calor son función de la temperatura.

Ejemplos típicos de problemas no lineales se encuentran en estudio del problema de radiación del calor en el que el flujo de calor a través del contorno es función de la cuarta potencia de la temperatura (ec.(1.30)) y en problemas de cambio de fase, donde el calor específico es una función altamente no lineal de la temperatura. El estudio de este último tipo de problemas se abordará con más detalle en el próximo capítulo.

En este capítulo no trataremos las no linealidades inducidas por el acoplamiento de la ecuación del calor con ecuaciones de la mecánica de sólidos o de fluidos. Es decir, supondremos que el dominio de análisis no cambia y que el campo de velocidades es constante y con divergencia nula (flujo incompresible).

La organización del capítulo es como sigue. Seguidamente se estudiará la solución general del problema no lineal de transmisión del calor estacionario. Tras ello se describirá el planteamiento de solución de problemas transitorios no lineales utilizando algoritmos de integración temporal explícitos e implícitos.

5.2 ANÁLISIS DE PROBLEMAS DE TRANSMISIÓN DEL CALOR NO LINEALES ESTACIONARIOS

Consideremos la ecuación de transmisión del calor estacionaria

$$-\mathbf{u}^T \nabla \phi + \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad \text{en } \Omega_q \quad (5.1)$$

con condiciones de contorno

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en } \Gamma_\phi \quad (5.2)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} = 0 \quad \text{en } \Gamma_q \quad (5.2)$$

en que alguna de las propiedades del material o los términos de fuente/absorción son una función no lineal de la temperatura. Es decir

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(\phi), \quad Q = Q(\phi), \quad \bar{q} = \bar{q}(\phi) \quad (5.3)$$

Un ejemplo es el caso de transmisión del calor por radiación en el que el flujo de calor a través del contorno es una función cuártica de la temperatura; es decir

$$\bar{q} = \alpha(\phi^4 - \phi_{\text{ext}}^4) \quad (5.4)$$

La forma discretizada del MEF de las ecs. (5.1) y (5.2) se obtiene por el procedimiento usual descrito en capítulos anteriores. Por conveniencia reescribiremos ahora el sistema de ecuaciones algebraicas resultantes como

$$\mathbf{r}(\mathbf{a}) = \mathbf{p}(\mathbf{a}) - \mathbf{f}(\mathbf{a}) = 0 \quad (5.5)$$

En la ecuación anterior $\mathbf{r}(\mathbf{a})$ es el vector de flujos residuales, mientras que los vectores $\mathbf{p}(\mathbf{a})$ y $\mathbf{f}(\mathbf{a})$ se denominan vector de flujos nodales internos y externos, respectivamente.

La forma general del vector $\mathbf{p}(\mathbf{a})$ se escribe como

$$p_i(\mathbf{a}) = - \int_{\Omega} \mathbf{B}_i^T \mathbf{q}(\mathbf{a}) d\Omega + \int_{\Gamma_q} \alpha(a) N_i \bar{q}(a) d\Gamma \quad (5.6)$$

En (5.6) $\mathbf{q}(\mathbf{a})$ es el vector de flujos de calor que puede tener una dependencia no lineal con la temperatura. Los casos más típicos son (Figura 5.1)

Dependencia secante

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}_s(\mathbf{a})\mathbf{g} = -\mathbf{D}_s(\mathbf{a})\mathbf{B}\mathbf{a} \quad (5.7)$$

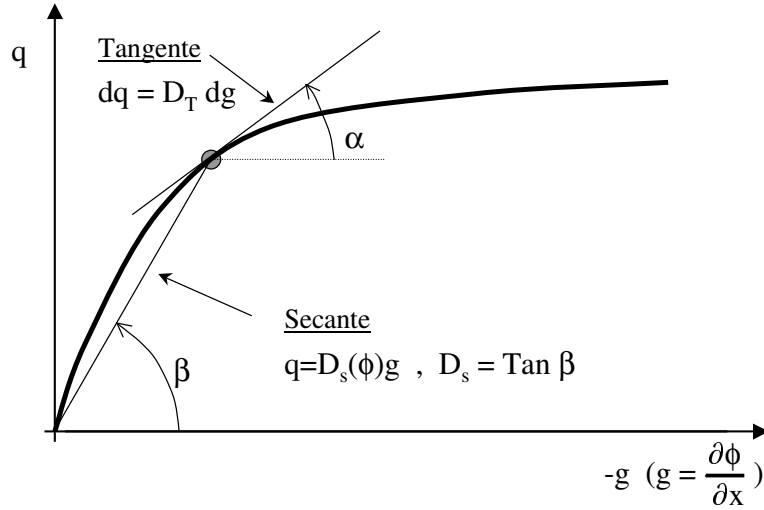


Figura 5.1: Relaciones no lineal secante y tangente entre flujo de calor y gradiente de temperatura en el problema 1D

Dependencia tangente

$$dq = -D_T(\mathbf{a})dg = -D_T(\mathbf{a})Bd\mathbf{a} \quad (5.8)$$

Obviamente en un material lineal $\mathbf{q} = -D\mathbf{g} = -D\mathbf{B}\mathbf{a}$.

En las ecs. (5.7) y (5.8) \mathbf{g} es el vector de gradientes de la temperatura ($\mathbf{g} = \nabla \phi$).

La segunda integral en (5.6) se debe a efectos de radiación en el contorno de Neumann. Un típico ejemplo es la dependencia de \bar{q} con la cuarta potencia de la temperatura en el contorno expresada por la ec. (5.4).

La dependencia del vector de flujos nodales internos \mathbf{f} con \mathbf{a} en (5.5) se puede deber a la dependencia de la fuente o los coeficientes de convección y/o radiación con la temperatura.

Obviamente para el caso lineal

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = \mathbf{K}\mathbf{a} \quad (5.9a)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{a}) = \mathbf{f} \quad (5.9b)$$

recuperándose la ecuación matricial estándar $\mathbf{K}\mathbf{a} = \mathbf{f}$. La expresión de la matriz de rigidez \mathbf{K} y el vector de flujos nodales equivalentes coincide en este caso con las obtenidas en capítulos anteriores (para el problema de transmisión del calor por conducción).

5.3 SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES NO LINEAL

5.3.1 Método de iteración directa

Supongamos que la forma del sistema de ecuaciones no lineales resultante de la discretización se escribe como

$$\mathbf{K}(\mathbf{a})\mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (5.10)$$

El esquema iterativo más sencillo para solución de la ec. (5.10) es

$$\mathbf{a}^{n+1} = [\mathbf{K}(\mathbf{a}^n)]^{-1}\mathbf{f} \quad (5.11)$$

donde \mathbf{a}^n representa valores del vector de temperaturas nodales en la iteración n -ésima. Este método se conoce como de iteración directa, método secante o método de Picard. La solución iterativa de la ec. (5.10) prosigue hasta que la diferencia entre los valores del vector \mathbf{a} entre dos iteraciones sucesivas es suficientemente próximo. Esta condición de convergencia suele medirse en la práctica en función de una cierta norma de la diferencia de los valores entre \mathbf{a}^{n+1} y \mathbf{a}^n . La norma más popular es la cuadrática que se escribe como

$$\|\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{a}^n\| = \frac{1}{n} \left[\sum_i (a_i^{n+1} - a_i^n)^2 \right]^{1/2} \leq \varepsilon \quad (5.12)$$

donde el sumatorio se extiende sobre el número total de nodos en la malla y ε es la tolerancia de error admitida. En la práctica se suele tomar $\varepsilon \cong 10^{-2} - 10^{-3}$.

El proceso iterativo de la ec. (5.11) se representa gráficamente en la Figura 5.2a. Este proceso puede no converger en problemas altamente no lineales si la solución inicial \mathbf{a}^0 está lejos del valor final. En la Figura 5.2b se muestra un ejemplo de proceso iterativo divergente utilizando el esquema (5.11).

5.3.2 Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson es el más popular para solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales [6].

Consideremos la solución del sistema no lineal expresado por

$$\mathbf{r}(\mathbf{a}) = \mathbf{p}(\mathbf{a}) - \mathbf{f}(\mathbf{a}) = 0 \quad (5.13)$$

Supongamos que se conoce una solución aproximada \mathbf{a}^n . Obviamente al no ser una solución exacta, se cumple que

$$\mathbf{r}^n \equiv \mathbf{r}(\mathbf{a}^n) \neq 0 \quad (5.14)$$

Escojamos una perturbación de la solución \mathbf{a}^n definida por $\Delta\mathbf{a}^n$ tal que

$$\mathbf{r}^{n+1} \equiv \mathbf{r}(\mathbf{a}^{n+1}) = \mathbf{p}(\mathbf{a}^{n+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{a}^{n+1}) = 0 \quad (5.15)$$

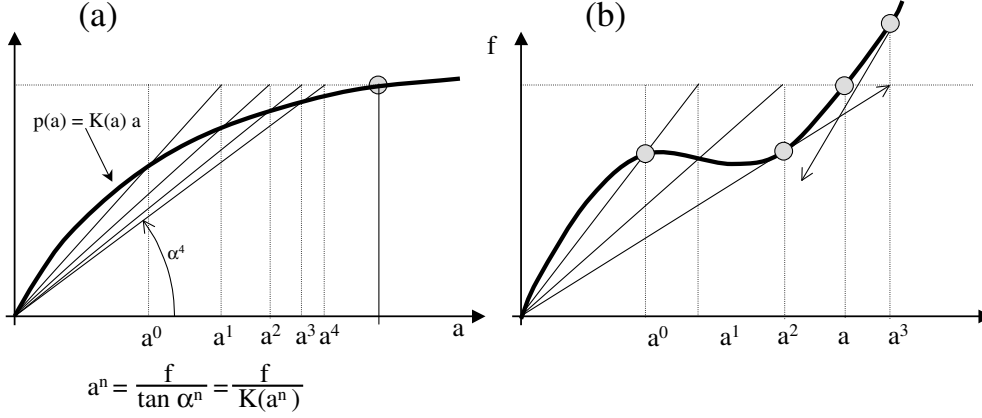


Figura 5.2: Método de iteración directa. a) Proceso iterativo convergente. b) Proceso iterativo divergente

con

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \Delta \mathbf{a}^n \quad (5.16)$$

Obviamente, la solución del sistema no lineal (5.15) es igual de difícil que el problema original (5.13). Para simplificar el proceso se desarrolla en series de Taylor el vector de flujos residuales \mathbf{r}^{n+1} en la proximidad de la solución \mathbf{a}^n

$$\mathbf{r}^{n+1} \equiv \mathbf{r}(\mathbf{a}^n + \Delta \mathbf{a}^n) = \mathbf{r}^n + \left. \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{a}} \right|_n \Delta \mathbf{a}^n + O(\Delta \mathbf{a}^2) \quad (5.17)$$

Tomando los dos primeros términos de desarrollo de Taylor anterior, puede encontrarse un valor mejorado de la solución calculando el vector $\Delta \mathbf{a}^n$ de manera que

$$\mathbf{r}^n + \left. \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{a}} \right|_n \Delta \mathbf{a}^n = \mathbf{0} \quad (5.18)$$

o

$$\mathbf{r}^n + \mathbf{K}_T^n \Delta \mathbf{a}^n = \mathbf{0} \quad (5.19)$$

con

$$\mathbf{K}_T = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{a}} \quad (5.20)$$

La matriz \mathbf{K}_T se denomina matriz de rigidez tangente [6]. Su expresión depende de la dependencia de los vectores \mathbf{p} y \mathbf{f} con \mathbf{a} . En el apartado siguiente se detalla el cálculo de \mathbf{K}_T .

De (4.19) se deduce

$$\Delta \mathbf{a}^n = -[\mathbf{K}_T^n]^{-1} \mathbf{r}^n \quad (5.23)$$

El valor mejorado del campo de temperaturas se obtiene por

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \Delta \mathbf{a}^n \quad (5.24)$$

La convergencia del proceso iterativo se puede medir en la norma de los valores de $\Delta \mathbf{a}^n$. Es no obstante más preciso comprobar el valor del vector de flujos residuales \mathbf{r}^{n+1} obtenido a partir del valor de \mathbf{a}^{n+1} . Así, si

$$\frac{\|\mathbf{r}^{n+1}\|}{\|\mathbf{f}^{n+1}\|} \leq \varepsilon \quad (5.25)$$

se detiene el proceso iterativo. Si no se cumple (5.25), se repite el proceso de cálculo de las ecuaciones (5.23)-(5.25) para obtener \mathbf{a}^{n+2} . etc.

En (5.25) $\|\cdot\|$ es la norma cuadrática de un vector definida por la ec.(5.12). La norma del vector \mathbf{f}^{n+1} se incluye en el denominador de (5.25) para relacionar el valor de la norma de \mathbf{r}^{n+1} con un valor de referencia. Es decir, se acepta que la solución ha convergido cuando la norma de \mathbf{r}^{n+1} es lo suficientemente pequeña en comparación con la del vector de flujos nodales.

En la Figura 5.3 se muestra la representación gráfica del proceso iterativo de Newton-Raphson. En dicha figura se muestra también un ejemplo de divergencia de este proceso. Estas divergencias son típicas en problemas altamente no lineales y cuando el valor inicial está lejos de la solución final.

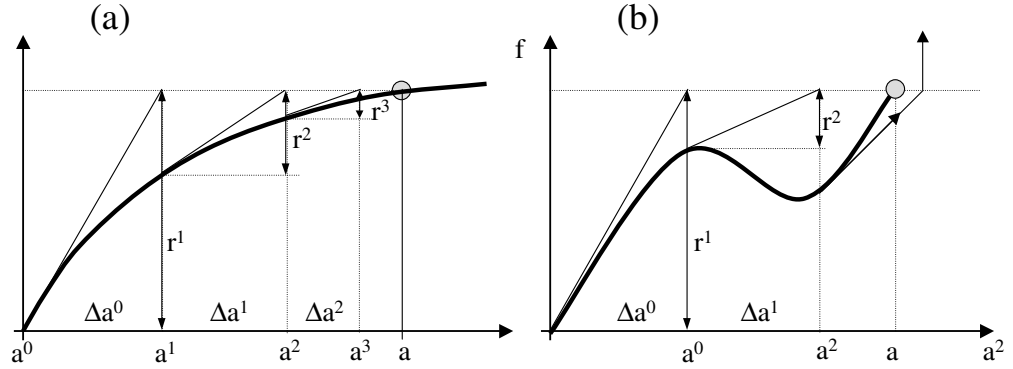


Figura 5.3: Método de Newton-Raphson. a) Proceso iterativo convergente. b) Proceso iterativo divergente

5.3.3 Cálculo de la matriz de rigidez tangente

De la ec. (5.20) se deduce la expresión de la matriz de rigidez tangente como

$$K_{T_{ij}} = \frac{\partial r_i}{\partial a_j} = \frac{\partial}{\partial a_j}(p_i - f_i) \quad (5.26)$$

Si el vector de flujos nodales no depende de la temperatura, la expresión de la matriz tangente es simplemente

$$\mathbf{K}_T = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{a}} \quad \text{o} \quad K_{T_{ij}} = \frac{\partial p_i}{\partial a_j} \quad (5.27)$$

En el caso usual de que la no linealidad se deba a la dependencia de la matriz de conductividad con la temperatura, la expresión de \mathbf{K}_T en este caso es

$$\mathbf{K}_T = \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{q} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{a}} d\Omega \quad (5.26)$$

Ahora

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{a}} = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{a}} = -\mathbf{D}_T \mathbf{B} \quad (5.27)$$

y

$$\mathbf{K}_T = - \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D}_T \mathbf{B} d\Omega \quad (5.28)$$

siendo

$$\mathbf{D}_T = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{g}} \quad (5.29)$$

la matriz de conductividad tangente (Figura 5.1).

5.4 VARIACIONES DEL MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

El método de Newton-Raphson exige el cálculo e inversión de la matriz de rigidez tangente en cada iteración. Este puede ser un proceso muy costoso que puede simplificarse de diversas formas.

La simplificación más usual es mantener la matriz de rigidez tangente *constante* durante todo (o parte) del proceso iterativo. El cálculo del incremento de temperatura se escribe por

$$\Delta \mathbf{a}^i = -[\mathbf{G}^i]^T \mathbf{r}^i \quad (5.30)$$

donde \mathbf{G} es la pseudo-matriz tangente en el proceso iterativo. Naturalmente en el método de Newton-Raphson “exacto”

$$\mathbf{G}^i = \mathbf{K}_T^i = \left. \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{a}} \right|_i \quad (5.31)$$

Obviamente, si $\mathbf{G} \neq \mathbf{K}_T^i$ se pierde la propiedad de la convergencia cuadrática del método de Newton-Raphson. Esto no es un mayor problema para la bondad del resultado final, siempre que este satisfaga la condición final de balance de flujos medida por una norma del vector de flujos residuales \mathbf{r} (ver ec.(5.25)).

Existen numerosas opciones para seleccionar la matriz de iteración \mathbf{G} . La más sencilla es mantener \mathbf{G} constante de manera que $\mathbf{G} = \mathbf{K}$, es decir iterar con la matriz de conductividad del problema lineal. Esta opción funciona razonablemente bien en problemas de baja no linealidad [6].

La opción más popular es \mathbf{G} constante e igual a la matriz de rigidez tangente calculada en una iteración previa.

Así

$$\mathbf{G}^i = \mathbf{K}_T^j, \quad j = \text{cte} \quad (5.32)$$

Obviamente el valor de j puede actualizarse cada cierto número de iteraciones. En la Figura 5.4 se representa gráficamente este proceso iterativo que recibe el nombre de método de Newton-Raphson *modificado*.

Existen diversas técnicas para acelerar la convergencia del método de Newton-Raphson. Una de las más populares se denomina *método de longitud de arco* y se basa en obtener un valor mejorado de la solución iterativa, retornando a la curva de equilibrio a través de un arco de círculo. Otra alternativa es utilizar una recta inclinada para efectuar este retorno. En la Figura 5.5 se representan esquemáticamente ambas opciones. Para mayores detalles se recomienda consultar la referencia [6].

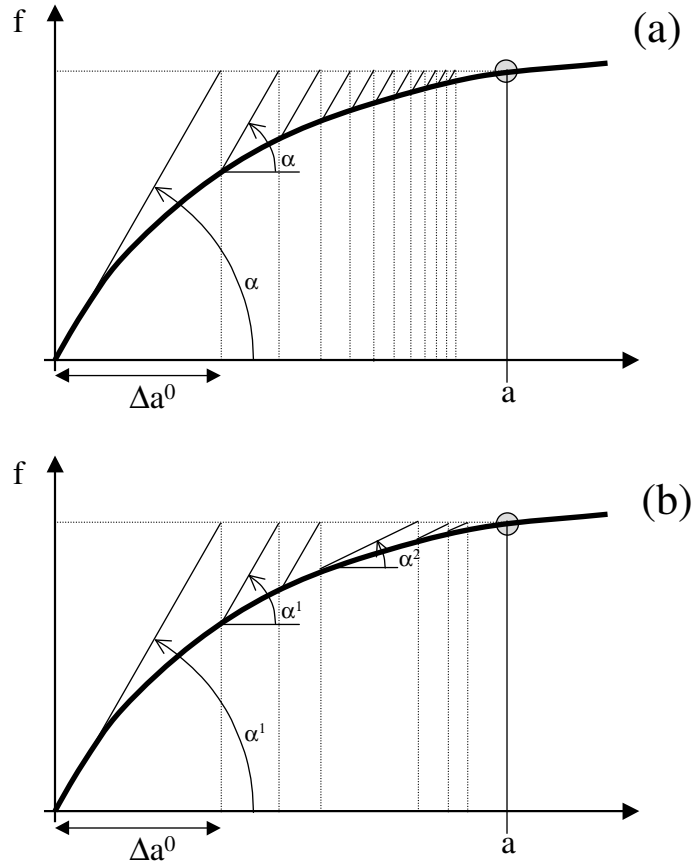


Figura 5.4: Método de Newton-Raphson modificado. a) Matriz de iteración $\mathbf{G} = \mathbf{K}_T^1$ durante todo el proceso iterativo. b) Actualización de la matriz de iteración tangente cada tres iteraciones

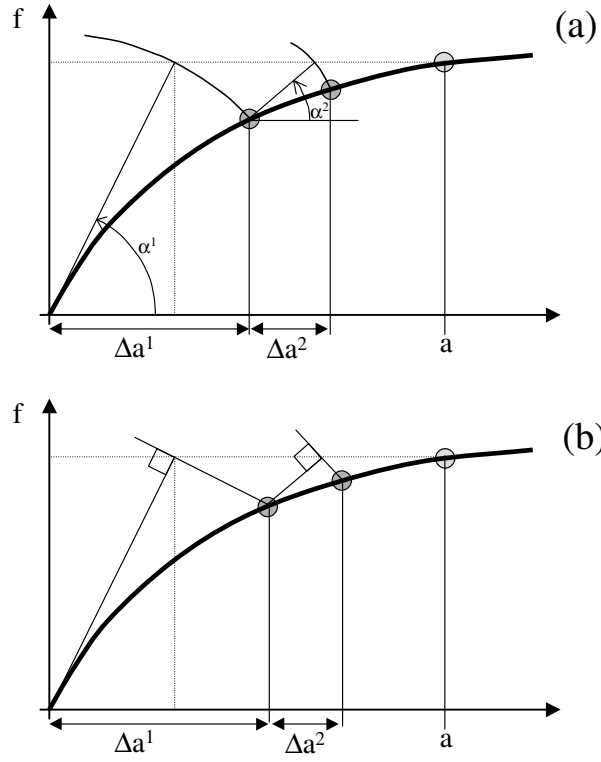


Figura 5.5: Métodos de longitud de arco. a) Retorno circular. b) Retorno ortogonal

5.5 PROBLEMA TRANSITORIO NO LINEAL

La forma discretizada de la ecuación del calor transitoria no lineal puede escribirse en la forma más general por

$$\mathbf{C}(\mathbf{a})\dot{\mathbf{a}} + \mathbf{K}(\mathbf{a})\mathbf{a} - \mathbf{f}(\mathbf{a}) = \mathbf{0} \quad (5.33)$$

donde \mathbf{C} , \mathbf{K} y \mathbf{f} son funciones de las temperaturas nodales \mathbf{a} .

El vector de flujos residuales en el tiempo t_n se escribe como

$$\mathbf{r}^n = \mathbf{C}^n \dot{\mathbf{a}}^n + \mathbf{K}^n \mathbf{a}^n - \mathbf{f}^n \quad (5.34)$$

Obviamente, en situación de balance térmico debe cumplirse $\mathbf{r}^n = \mathbf{0}$. La solución del problema no lineal se plantea de la siguiente forma: dados \mathbf{a}^n y $\dot{\mathbf{a}}^n$ encontrar \mathbf{a}^{n+1} y $\dot{\mathbf{a}}^{n+1}$ de manera que se cumpla

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{C}^{n+1} \dot{\mathbf{a}}^{n+1} + \mathbf{K}^{n+1} \mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{0} \quad (5.35)$$

Presentaremos seguidamente un sencillo algoritmo iterativo de predicción-corrección para resolver este problema:

Etapa 1 Iniciar el contador de iteraciones $i = 0$

Etapa 2 Predicción:

$${}^i\dot{\mathbf{a}}^{n+1} = \dot{\mathbf{a}}^n \quad (5.36)$$

$${}^i\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n + \dot{\mathbf{a}}^n \Delta t \quad (5.37)$$

donde ${}^i(\cdot)$ indica valores en la iteración i -ésima.

Etapa 3 Cálculo del vector de fuerzas residuales

$${}^i\mathbf{r}^{n+1} = {}^i\mathbf{C}\dot{\mathbf{a}}^{n+1} + {}^i\mathbf{K}\mathbf{a}^{n+1} - {}^i\mathbf{f} \quad (5.38)$$

con

$${}^i\mathbf{C} = \mathbf{C}({}^i\mathbf{a}^{n+1}) \quad (5.39)$$

$${}^i\mathbf{K} = \mathbf{K}({}^i\mathbf{a}^{n+1}) \quad (5.40)$$

$${}^i\mathbf{f} = \mathbf{f}({}^i\mathbf{a}^{n+1}) \quad (5.41)$$

Naturalmente si $\|{}^i\mathbf{r}^{n+1}\| \leq \epsilon$, la solución es la buscada.

Etapa 4 Cálculo del incremento de temperaturas nodales.

Se utiliza el método de Newton-Raphson para resolver la ecuación (4.38). La expresión incremental resultante es (ver Apartado 5.3.2)

$${}^i\mathbf{K}_T \Delta \mathbf{a}^i = -{}^i\mathbf{r}^{n+1} \quad (5.42)$$

y

$$\Delta \mathbf{a}^i = -[{}^i\mathbf{K}_T]^{-1} {}^i\mathbf{r}^{n+1} \quad (5.43)$$

En (4.42) ${}^i\mathbf{K}_T$ es la matriz de rigidez tangente cuya expresión se obtiene por

$${}^i\mathbf{K}_T = \frac{\partial {}^i\mathbf{r}^{n+1}}{\partial {}^i\mathbf{a}^{n+1}} \quad (5.44)$$

La expresión ${}^i\mathbf{K}_T$ exacta puede ser difícil de obtener en problemas altamente no lineales con dependencias complejas de \mathbf{C} , \mathbf{K} y \mathbf{f} con la temperatura. En estos casos suele utilizarse una expresión aproximada basada en despreciar la dependencia de estas matrices con la temperatura. Así de (5.44) se deduce

$${}^i\mathbf{K}_T = \frac{\partial}{\partial {}^i\mathbf{a}^{n+1}} [{}^i\mathbf{C}\mathbf{a}^{n+1} + {}^i\mathbf{K}\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{f}] \simeq {}^i\mathbf{C} \frac{\partial}{\partial {}^i\mathbf{a}^{n+1}} \left(\frac{{}^i\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{a}^n}{\Delta t} \right) + {}^i\mathbf{K} \quad (5.45)$$

De (5.45) se deduce

$$\boxed{{}^i\mathbf{K} = \frac{1}{\Delta t} {}^i\mathbf{C} + {}^i\mathbf{K}} \quad (5.46)$$

Capítulo 6

PROBLEMAS DE CAMBIO DE FASE

6.1 INTRODUCCIÓN

El cambio de fase es común en situaciones de solidificación, fundición, vaporización y condensación, etc. La transformación directa de sólido a vapor se denomina sublimación. Desde un punto de vista termodinámico, cuando un sistema consta de más de una fase, cada fase puede considerarse como un sistema separado dentro del conjunto. Los parámetros termodinámicos del sistema completo pueden entonces construirse a partir de las dos fases. En este capítulo consideraremos únicamente sistemas de dos fases (líquido y sólido), y supondremos que la interacción entre las fases se restringe al flujo del calor en la interface.

El proceso de cambio de fase más popular es, sin duda, la fundición del hielo y la solidificación del agua. El estudio de problemas de cambio de fase puede ser necesario en áreas tan poco usuales como el análisis de recipientes de carburante nuclear y otros problemas en el campo de la generación de energía nuclear, como la prevención de accidentes. Algunos sistemas de almacenamiento de energía solar utilizan materiales que cambian de fase para almacenar energía térmica en forma de calor latente. Otras aplicaciones geotécnicas incluyen la congelación de suelos para excavaciones; construcción sobre zonas congeladas, formación de rocas por congelación de erupciones volcánicas, etc. [51,52]. En el conformado de plásticos se suceden cambios de fase pero con pequeñas cantidades de calor latente. En la industria de la alimentación se encuentran aplicaciones de los modelos de cambio de fase en la congelación de carne y otros alimentos, el secado por congelación del café, etc. En medicina, la técnica de crio-cirugía (congelación y eliminación de tejido maligno) involucra el modelado del cambio de fase. El crecimiento de cristales en semiconductores es otra aplicación. Otro ejemplo es el análisis de contenedores resistentes al fuego que incorporan materiales que cambian de fase, con alto calor latente para absorber calor al fundirse y así retrasar el deterioro del contenido [53].

Sin embargo, la aplicación más importante de los modelos de cambio de fase se presenta en el estudio de procesos metalúrgicos, tales como la purificación de metales; el crecimiento de cristales puros de mezclas fundidas; la solidificación de piezas fundidas; la soldadura; la colada continua, etc. [8,54–65].

La fundición y la solidificación son procesos de cambio de fase que van acompañados de absorción o liberación de energía térmica. Existe una frontera móvil que separa las dos fases con propiedades mecánicas diferentes y en la que se libera o absorbe energía térmica. Como ejemplo, si consideramos la solidificación de una pieza fundida, el calor en la mezcla y el calor latente de fusión liberado en la interfaz sólido-líquido se transfieren a través del metal solidificado, la interfaz entre el metal y el molde y el propio molde, encontrando en cada uno de estos recorridos una cierta resistencia térmica. Durante la solidificación de aleaciones binarias y multicomponentes, los fenómenos físicos se hacen más complicados debido a las transformaciones de fase que se producen durante un rango de temperaturas. La temperatura más baja, correspondiente a la fase líquida completa, se denomina el “liquidus” y la temperatura más alta, correspondiente a la fase sólida, se denomina “solidus”. Estas temperaturas varían de acuerdo con la concentración de los diferentes componentes de la aleación definidas por su diagrama de fases. Durante la solidificación de una aleación, las concentraciones pueden variar localmente de la mezcla original, ya que nuevo material puede incorporarse o apartarse en la zona del frente de solidificación. Dicha zona es parte sólido y parte fluido y se asemeja a un medio poroso, denominándose en la práctica *zona pastosa*.

Es evidente de lo anterior que la completa comprensión del fenómeno de cambio de fase involucra el análisis de los diferentes procesos que lo acompañan. El más importante de éstos, desde el punto de vista macroscópico, es el de transferencia de calor. Su estudio se complica por la liberación o absorción del calor latente de fusión en la interfaz líquido/sólido. En la práctica existen diversos métodos para tener en cuenta el efecto del calor latente en un programa de análisis térmico por el MEF. Los métodos se dividen en métodos de *mallla fija* y de *mallla móvil*. Como sugieren los nombres, en los métodos de *mallla fija* se resuelve un sistema continuo dentro del cual se modela la progresión del cambio de fase [54,60]. En los métodos de *mallla móvil*, las regiones del sólido y del fluido se tratan por separado, y la interfaz de cambio de fase se trata como un contorno móvil. En este capítulo limitaremos el estudio a los métodos de *mallla fija*. En las referencias [54–59] pueden encontrarse detalles de otros métodos de *mallla móvil*.

6.2 EL PROBLEMA DE STEFAN

El problema de solidificación se conoce generalmente como *problema de Stefan*, debido a que este problema se estudió por primera vez por Stefan para calcular el espesor de hielo del casquete polar. El problema clásico se plantea considerando la ecuación de la energía en el dominio Ω , dividiéndolo en dos dominios diferentes Ω_l y Ω_s , con $\Omega_l + \Omega_s = \Omega$. La ecuación de la energía se

escribe como

$$\rho_l c_l \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D}_l \nabla \phi + Q \quad \text{en } \Omega_l \quad (6.1)$$

y

$$\rho_s c_s \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D}_s \nabla \phi + Q \quad \text{en } \Omega_s \quad (6.2)$$

donde los subíndices l y s indican el líquido y el sólido, respectivamente. La descripción completa del problema requiere, además de las condiciones estándar en los contornos de Dirichlet y de Neumann y las iniciales, las condiciones en la interfaz de cambio de fase Γ_{sl} , que son

$$\phi_p = \phi_m \quad (6.3a)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D}_l (\nabla \phi)_s - \mathbf{n}^T \mathbf{D}_s (\nabla \phi)_l = \rho L \frac{dp}{dt} \quad \text{en } \Gamma_{sl} \quad (6.3b)$$

donde p representa la posición de la interfaz y $\frac{dp}{dt}$ la velocidad de movimiento de la interfaz y T_m la temperatura de cambio de fase. La principal complicación al resolver las ecs.(6.1)–(6.3) es la indefinición de la posición de la interfaz de cambio de fase, cuya posición cambia en cada instante de tiempo.

6.3 ANÁLISIS POR EL MEF DE PROBLEMAS DE CAMBIO DE FASE

Como se ha mencionado antes, los métodos de malla móvil para seguimiento del frente intentan resolver el problema clásico en su forma más pura satisfaciendo explícitamente las condiciones en la interfaz. Estos métodos pueden utilizarse para resolver problemas de cambio de fase isotérmicos con buena precisión, pero se complican extremadamente cuando hay que tratar formas geométricas de la interface complejas que varían con el tiempo. Debido a estas dificultades, consideraremos en lo que sigue únicamente el método de malla fija. Este método es muy general y permite considerar todas las condiciones del cambio de fase sin necesidad de establecer a priori la posición del frente. Los métodos de malla fija se basan en la formulación integral de Galerkin obtenida a partir de las ecuaciones diferenciales de gobierno.

El punto de partida de la solución numérica es la ecuación de balance térmico escrita en función de la entalpía. A partir de esta expresión puede formularse el problema en términos de la entalpía de la temperatura. Explicaremos seguidamente las bases de esta formulación y la obtención de las ecuaciones del MEF.

6.3.1 Definición de entalpía

La ecuación de conservación de la energía puede escribirse para todo el dominio de análisis como

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q \quad (6.4)$$

donde H es la función de entalpía, que se define como el contenido de calor total, por [63]

$$H = \int_{\phi_{ref}}^{\phi} \rho c dT + \rho L f \quad (6.5)$$

donde c es el calor específico, ϕ_{ref} es una temperatura de referencia, L es el calor latente que se libera en un problema de enfriamiento o que se absorbe en un problema de fundición y f es una función de cambio de fase definida por

$$f(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{para } \phi \leq \phi_m \\ 1 & \text{para } \phi > \phi_m \end{cases} \quad (6.6)$$

para un problema isotérmico, (Figura 6.1a)

$$f(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{para } \phi \leq \phi_s \\ 0 < g(\phi) \leq 1 & \text{para } \phi_s < \phi \leq \phi_l \\ 1 & \text{para } \phi > \phi_l \end{cases} \quad (6.7)$$

para el problema no isotérmico, (Figura 6.1b).

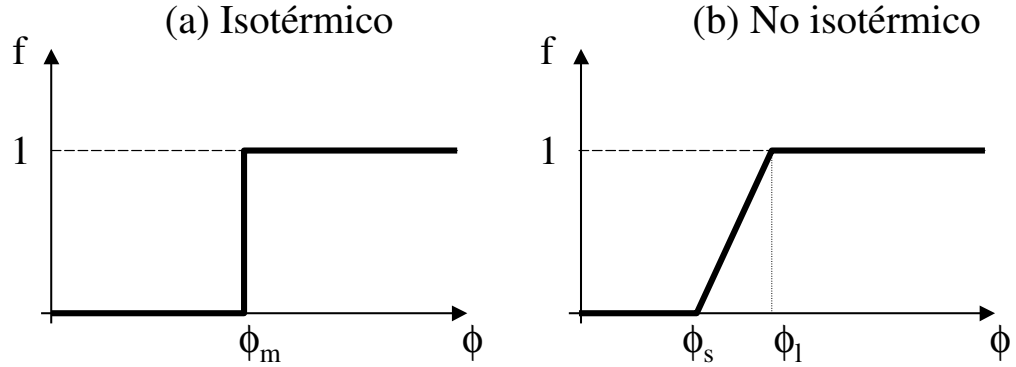


Figura 6.1: Función de cambio de fase para los casos isotérmicos y no isotérmicos

En las ecuaciones anteriores, ϕ_m indica la temperatura de mezcla de las fases y ϕ_s y ϕ_l las temperaturas de las fases sólida y líquida, respectivamente. La forma de la función $g(\phi)$ en (6.7) puede obtenerse utilizando un modelo microestructural. La expresión más sencilla de $g(\phi)$ es la variación lineal definida por, (Figura 6.1b)

$$g(\phi) = \frac{\phi - \phi_s}{\phi_l - \phi_s} \quad (6.8)$$

Para el caso isotérmico, la ec.(6.6) indica que la entalpía es discontinua en la interfaz del cambio de fase, lo que introduce una alta no linealidad en el

problema. Esta no linealidad se suaviza en el problema no isotérmico, ya que la derivada de la entalpía está bien definida sobre la zona pasiva.

De la ec.(6.5) se deduce que

$$\frac{\partial H}{\partial \phi} = \rho c + \rho L \frac{\partial f}{\partial \phi} \quad (6.9)$$

y

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\rho c + \rho L \frac{\partial f}{\partial \phi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (6.10)$$

Utilizando (6.10), la ec.(6.4) puede reescribirse como

$$\left(\rho c + \rho L \frac{\partial f}{\partial \phi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q \quad (6.11)$$

Del examen de la ec.(6.11) se advierte que puede definirse un calor específico efectivo por

$$\bar{c} = c + L \frac{\partial f}{\partial \phi} \quad (6.12)$$

La ecuación de balance térmico puede reescribirse utilizando (6.12) como

$$\rho \bar{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q \quad (6.13)$$

Las condiciones de contorno de la ec.(6.13) son las usuales en un problema de transmisión del calor por conducción

$$\phi - \bar{\phi} = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_\phi \quad (6.14a)$$

$$\mathbf{n}^T \mathbf{D} \nabla \phi + \bar{q} = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_q \quad (6.14b)$$

En la ec.(6.14b), \bar{q} es el flujo de calor que sale en dirección normal al contorno de Neumann Γ_q . Por sencillez no se consideran pérdidas de calor por convección en este contorno. En (6.14a), $\bar{\phi}$ es la temperatura prescrita sobre el contorno de Dirichlet Γ_ϕ .

6.3.2 Formulación de elementos finitos

El campo de temperaturas se interpola sobre el dominio de análisis Ω utilizando elementos finitos en la forma usual como

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \sum_i N_i^{(e)} \phi_i \quad (6.15)$$

Aplicando el método de residuos ponderados de Galerkin a las ecs.(6.13)–(6.15) se obtienen las ecuaciones de la discretización del MEF en la forma usual

$$\mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \mathbf{K} \mathbf{a} = \mathbf{f} \quad (6.16)$$

con

$$C_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} \rho \bar{c} N_j d\Omega \quad (6.17)$$

$$K_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \nabla^T N_i^{(e)} \mathbf{D} \nabla N_j^{(e)} d\Omega \quad (6.18)$$

$$f_i^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} Q d\Omega - \oint_{\Gamma_q} N_i^{(e)} \bar{q} d\Gamma \quad (6.19)$$

Obsérvese que las ecuaciones son idénticas a las obtenidas para el problema térmico estándar, sustituyendo el calor específico c por el nuevo calor específico efectivo \bar{c} dado por la ec.(6.12).

La solución del problema transitorio no lineal sigue precisamente las etapas explicadas en el Capítulo 5. La matriz de rigidez tangente en el proceso iterativo se aproxima por

$$\mathbf{K}_T = \mathbf{K} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{C} \quad (6.20)$$

Se observa que toda la no linealidad en el proceso de solución se concentra en el término $\frac{\partial f}{\partial \phi}$ de la ec.(6.12). El cálculo de esta derivada en problemas de cambio de fase *no isotérmicos* no presenta ningún problema, pues la derivada de f está bien definida. Aceptando la expresión (6.8), la derivada $\frac{\partial f}{\partial \phi}$ es simplemente

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = 0 \quad \text{para} \quad \phi \leq \phi_s \quad \text{y} \quad \phi > \phi_l \quad (6.21)$$

y

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{1}{\phi_l - \phi_s} \quad \text{para} \quad \phi_s < \phi \leq \phi_l \quad (6.22)$$

La dificultad surge en problemas *isotérmicos*. En estos casos, $\frac{\partial f}{\partial \phi}$ no está definida sobre la superficie de cambio de fase. Este problema se soslaya en la práctica *alisando* el valor de dicha derivada dentro del proceso iterativo para el cálculo de los valores de ϕ en el tiempo t_{n+1} , por

$$^j \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right)^{n+1} = \frac{1}{^j \phi^{n+1} - \phi^n} \quad \text{para} \quad ^j \phi^{n+1} > \phi_m, \quad \phi^n \leq \phi_m \quad (6.23)$$

donde $^j (\cdot)^{n+1}$ indica valores en el tiempo t_{n+1} correspondientes a la iteración j del proceso iterativo; y ϕ^n es la temperatura en el tiempo t_n . El efecto práctico de dicho alisado se representa en la Figura 6.2.

Obviamente, la calidad de la solución numérica en la zona próxima a la interfaz del cambio de fase depende del incremento de tiempo en el algoritmo de integración y también de la densidad de elementos en esa zona. Con incrementos de tiempo pequeños y refinando la malla de manera adaptable a medida que avanza el frente, pueden obtenerse soluciones muy precisas [8].

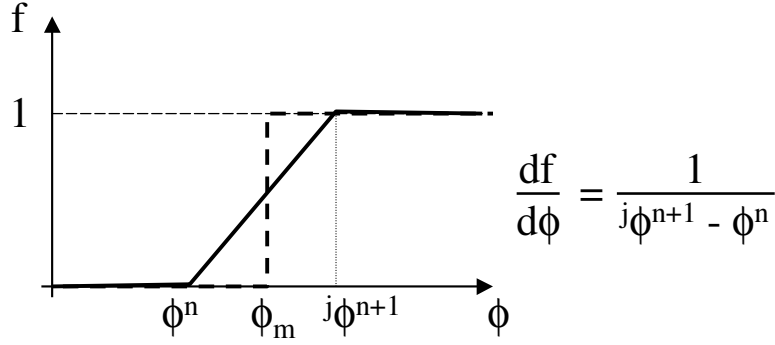


Figura 6.2: Regularización del cálculo de $\frac{df}{d\phi}$ en el caso isotérmico

Existen diversas variantes del método anterior. Por ejemplo, algunos autores prefieren operar con la entalpía como la variable fundamental del problema [6,66]. Otra opción es tratar el efecto del calor latente como un término de fuente adicional [67,68]. En todos los casos las dificultades surgen del alto gradiente producido por el calor absorbido o desprendido en la zona de la interface. Los interesados en ampliar información sobre los detalles de cada método numérico pueden consultar las referencias [8,55–69].

6.4 EJEMPLOS

6.4.1 Ejemplos de solidificación y fundición unidimensionales

En la Figura 6.3a se muestra la geometría del problema de solidificación unidimensional y las propiedades del material esenciales. Las temperaturas ϕ_o y ϕ_m indican los valores iniciales y de cambio de fase, respectivamente. El ejemplo puede resolverse sin hacer referencia a ningún sistema de unidades en particular, y se ha utilizado como referencia en numerosas publicaciones [8].

En la Figura 6.3b se resuelve el mismo ejemplo con temperaturas de signo opuesto como un problema de fundición.

Debido al carácter unidimensional del problema en los dos casos la solución numérica se obtiene con la malla de 20 elementos de 9 nodos que se muestra en la Figura 6.3c.

Solución analítica

La solución analítica que se presenta se ha tomado de la ref. [70].

Problema de solidificación

La posición del frente de solidificación se obtiene por

$$x = 2\lambda(k_st)^{1/2}$$

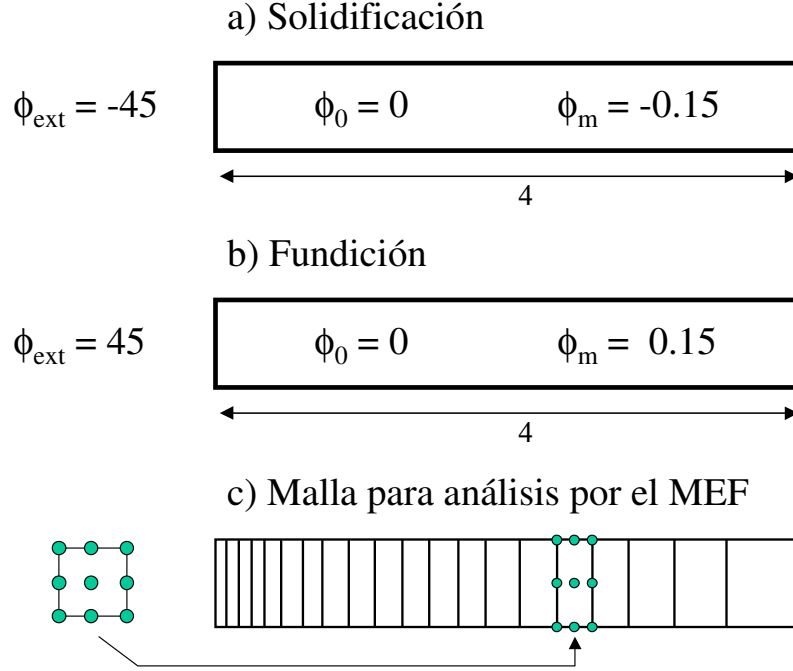


Figura 6.3: Problemas de solidificación y fundición unidimensionales. $L = 70, 26$, $\rho c = 1.0, k_s = k_l = k = 1.0$

La temperatura en la zona sólida ($x \leq x$ o $\phi \leq \phi_f$) viene dada por

$$\phi = \frac{\phi_f}{h_1(\lambda)} h_1 \left[\frac{x}{2(k_s t)^{1/2}} \right]$$

La temperatura en la zona líquida ($x \geq x$ o $\phi > \phi_f$) se obtiene por

$$\phi = \phi_\infty - \frac{\phi_\infty - \phi_f}{h_2 \left[\lambda \left(\frac{k_s}{k_l} \right)^{1/2} \right]} h_2 \left[\frac{x}{2(k_l t)^{1/2}} \right]$$

En las ecuaciones anteriores λ se obtiene resolviendo

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{h_1(\lambda)} - \left(\frac{k_l}{k_s} \right)^{1/2} \frac{\phi_\infty - \phi_f}{\phi_f} \frac{e^{-\lambda^2 \frac{k_s}{k_l}}}{h_2 \left[\lambda \left(\frac{k_s}{k_l} \right)^{1/2} \right]} = \frac{\lambda L \pi^{1/2}}{c_s \phi_f}$$

donde

$$h_1(x) = 1 - (a_1 b + a_2 b^2 + a_3 b^3 + a_4 b^4 + a_5 b^5) e^{-x^2} + \varepsilon$$

y

$$h_2(x) = 1 - h_1(x)$$

con

$$b = \frac{1}{1 + px} \quad , \quad p = 0,3275911$$

$$\begin{aligned} a_1 &= 0,2548295 & , & \quad a_2 = -0,2844967 \\ a_3 &= 1,4214137 & , & \quad a_4 = -1,4531520 \\ a_5 &= 1,0614054 & , & \quad \epsilon \leq 1,5 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

Problema de fusión

La posición del frente de fusión se obtiene por

$$x = 2\lambda(k_l t)^{1/2}$$

La temperatura en la zona líquida ($x \leq x$ o $\phi \geq \phi_f$) viene dada por

$$\phi = \phi_o - \frac{\phi_o - \phi_f}{h_1(\lambda)} h_1 \left[\frac{x}{2(k_l t)^{1/2}} \right]$$

La temperatura en la zona sólida ($x \geq x$ o $\phi \leq \phi_f$) se obtiene por

$$\phi = \frac{\phi_f}{h_2 \left[\lambda \left(\frac{k_l}{k_s} \right)^{1/2} \right]} h_2 \left[\frac{x}{2(k_s t)^{1/2}} \right]$$

El valor de λ en estas ecuaciones se deduce de

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{h_1(\lambda)} - \left(\frac{k_s}{k_l} \right)^{1/2} \frac{\phi_f}{\phi_o - \phi_f} \frac{e^{-\lambda^2 \frac{k_l}{k_s}}}{h_2 \left[\lambda \left(\frac{k_s}{k_l} \right)^{1/2} \right]} = \frac{\lambda L \pi^{1/2}}{c_l(\phi_o - \phi_f)}$$

Las funciones $h_1(x)$ y $h_2(x)$ son las mismas que para el problema de solidificación.

Solución numérica

En la Figura 6.4 y 6.5 se muestra la distribución temporal de la temperatura para los problemas de solidificación y fusión obtenida con la formulación de elementos finitos basada en el calor específico efectivo descrita en el apartado anterior, utilizando un incremento de tiempo de 0,1. Se comprueba que la solución numérica coincide bien con la analítica en ambos casos.

En la referencias [51–69] pueden encontrarse más ejemplos de problemas de cambio de fase resueltos por el MEF.

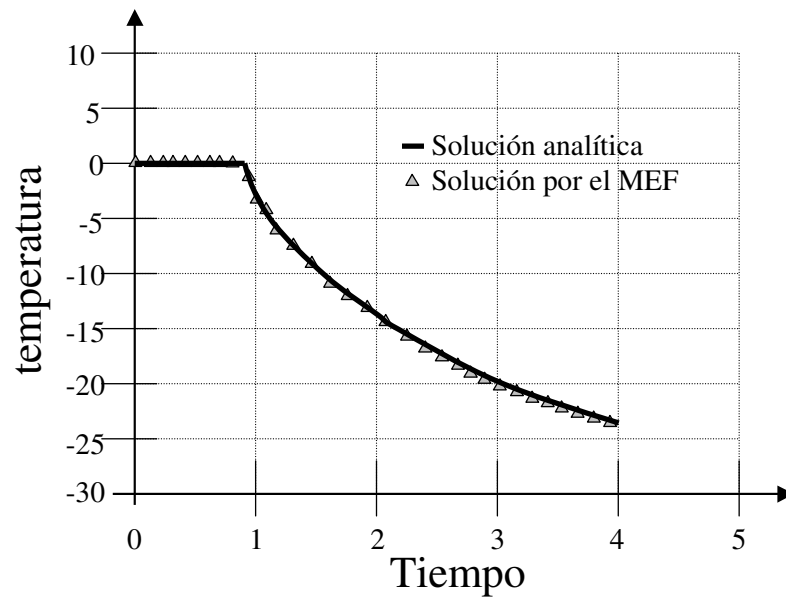


Figura 6.4: Problema de solidificación 1D. Comparación de los resultados obtenidos en el MEF con la solución analítica

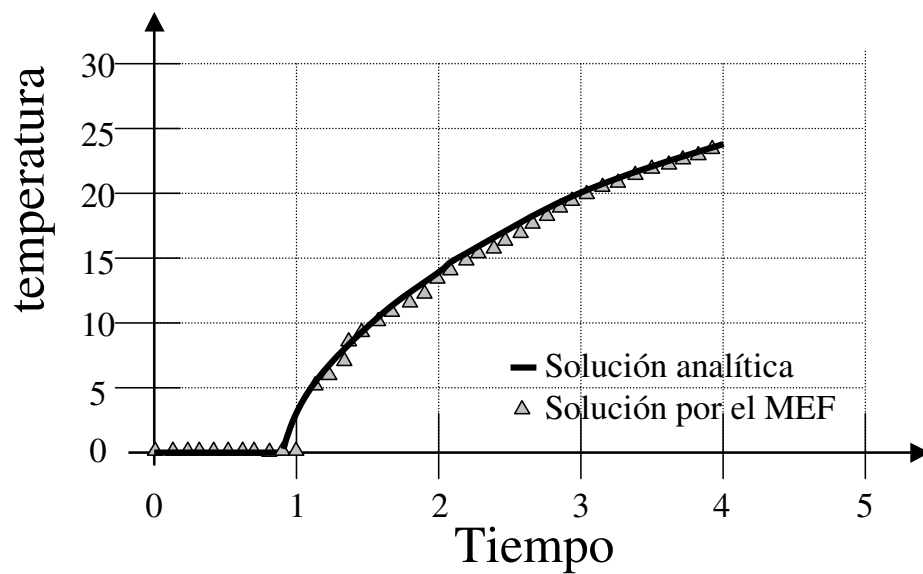


Figura 6.5: Problema de fusión 1D. Comparación de los resultados obtenidos en el MEF con la solución analítica

Capítulo 7

PROBLEMAS TÉRMICOS ACOPLADOS

7.1 INTRODUCCIÓN

Estudiaremos en este capítulo la solución por el método de elementos finitos de problemas térmicos acoplados. En primer lugar trataremos problemas termo-mecánicos, típicos de mecánica de sólidos. En estos problemas se produce un acoplamiento entre el campo de temperaturas y el estado tenso-deformacional en el sólido. Por sencillez, limitaremos el estudio detallado al denominado caso termo-mecánico unidireccional. Es decir, al estudio del campo de deformaciones y tensiones en un sólido en presencia de una variación en su distribución de temperaturas. El cambio de temperaturas origina una variación en el estado tenso-deformacional del cuerpo, pero se desprecian los efectos mecánicos en la distribución de temperaturas. Este tipo de problemas es usual en el estudio de las deformaciones y tensiones en estructuras y piezas mecánicas sometidas a un ciclo térmico conocido.

Una variante mucho más compleja del problema anterior es el estudio del acoplamiento termo-mecánico bidireccional completo. Es decir, estudiar la variación conjunta del estado tenso-deformacional y de la temperatura en el cuerpo durante su deformación teniendo en cuenta el acoplamiento completo entre los fenómenos mecánico y térmico. Este problema es típico en el estudio de procesos de fabricación de piezas metálicas por conformado, en donde las grandes deformaciones a las que se somete el material inducen cambios en la temperatura de la pieza durante el proceso de fabricación.

En la segunda parte del capítulo daremos unas pinceladas del análisis de problemas térmicos en fluidos en movimiento. En este caso, las ecuaciones de la transmisión del calor por convección-conducción están fuertemente acopladas con las de la dinámica de fluidos. A la complejidad del problema acoplado se añade generalmente la dificultad de la no linealidad intrínseca de las ecuaciones de la dinámica de fluidos. Las aplicaciones de este tipo de problemas son muy numerosas y abarcan el estudio de la ventilación libre y forzada en recintos, el estudio de flujos biológicos y geológicos, el análisis de procesos de llenado de

moldes de fundición, problemas de inyección de plásticos, etc...

7.2 PROBLEMAS TERMO-MECÁNICOS UNIDIRECCIONALES

Estudiaremos el análisis de la distribución de temperaturas en un sólido elástico y su efecto en el campo de desplazamientos, deformaciones y tensiones inducido por la variación térmica. Para mayor sencillez supondremos un comportamiento lineal en el sólido y también que el campo térmico no está afectado por la deformación del sólido. Como ya se ha mencionado, los problemas de este tipo se denominan acoplados unidireccionales, ya que el acoplamiento se produce por la influencia de la variación de la temperatura en el estado tenso-deformacional del sólido, mientras que los cambios mecánicos no afectan al problema térmico.

7.2.1 El problema térmico

La ecuación que rige la evolución de la temperatura en el sólido es la de la transmisión del calor por conducción. En el caso transitorio general, dicha ecuación se escribe como (ver Capítulo 3)

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi - Q = 0 \quad \text{en } [\Omega \times t] \quad (7.1)$$

La expresión general es válida para problemas uni, bi y tri dimensionales, definiendo adecuadamente el operador gradiente ∇ y la matriz de conductividades \mathbf{D} .

Las condiciones de contorno son las usuales para este tipo de problemas y pueden consultarse en el Capítulo 3.

La solución de la ec.(7.1) en el tiempo proporciona la evolución del valor de la temperatura en cada punto del sólido, desde el valor inicial ϕ^o (ver Capítulo 3). Obviamente, si las condiciones de contorno y el término de flujo Q tienen un valor estacionario, también se alcanzará un valor estacionario del valor de la temperatura al cabo de cierto tiempo. En lo que sigue, denominaremos ϕ^{est} al valor de la temperatura en el estado estacionario, es decir en el instante en que la diferencia entre los valores de las temperaturas en dos tiempos sucesivos, medida en una cierta norma, es menor que un valor prefijado.

Es interesante advertir que el valor estacionario del campo de temperaturas puede obtenerse directamente sin necesidad de resolver el problema transitorio, resolviendo simplemente las ecuaciones de gobierno para el caso estacionario dadas por

$$\nabla^T \mathbf{D} \nabla \phi + Q = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (7.2)$$

y las condiciones de contorno adecuadas (Capítulo 2).

La solución por el MEF del problema conductivo estacionario sigue las pautas estudiadas en el Capítulo 2.

En lo que sigue definiremos como incremento de temperatura en cada punto en el tiempo t_n por

$$\Delta\phi^{n,o} = \phi^n - \phi^o \quad (7.3)$$

En el problema discreto se define

$$\Delta\mathbf{a}^{n,o} = \mathbf{a}^n - \mathbf{a}^o \quad (7.4)$$

donde

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{a} &= [\Delta\phi_1, \Delta\phi_2, \dots, \Delta\phi_N]^T \\ \mathbf{a}^n &= [\phi_1^n, \phi_2^n, \dots, \phi_N^n]^T \\ \mathbf{a}^o &= [\phi_1^o, \phi_2^o, \dots, \phi_N^o]^T \end{aligned} \quad (7.5)$$

siendo N el número total de nodos en la malla.

Por conveniencia definiremos el incremento de temperatura en un punto entre dos instantes de tiempo sucesivos t_{n+1} y t_n por

$$\Delta\phi^{n+1} = \phi^{n+1} - \phi^n \quad (7.6)$$

y el incremento de temperatura entre el estado estacionario y el inicial por

$$\Delta\phi^{est} = \phi^{est} - \phi^o \quad (7.7)$$

En la Figura 7.1 se muestran los diferentes incrementos de temperatura mencionados.

Estas definiciones del incremento de temperatura son útiles para el estudio del problema elástico, como se describe en el apartado siguiente.

7.2.2 El problema mecánico acoplado térmicamente

Consideremos la deformación de un sólido elástico sometido a un conjunto de cargas exteriores y a una variación de la temperatura en cada uno de sus puntos. Bajo dichas acciones el cuerpo sufre unos desplazamientos y, por consiguiente, unas deformaciones y unas tensiones. Si el sólido en su deformación alcanza una situación de equilibrio, satisface el *Principio de Trabajos Virtuales* que se escribe por [6,12]

$$\int_{\Omega} \delta\boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int_{\Omega} \delta\mathbf{u}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \int_{\Gamma} \delta\mathbf{u}^T \mathbf{t} d\Gamma \quad (7.8)$$

En la ec.(7.8) $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{b} y \mathbf{t} son los vectores de tensiones, de fuerzas másicas y de fuerzas de superficie, respectivamente, $\delta\mathbf{u}$ es el vector de desplazamientos virtuales y $\delta\boldsymbol{\varepsilon}$ el vector de deformaciones virtuales. La ec.(7.8) expresa la igualdad entre el trabajo de las tensiones $\boldsymbol{\sigma}$ y las fuerzas exteriores \mathbf{b} y \mathbf{t} , al imponer al sólido un campo arbitrario de desplazamientos virtuales $\delta\mathbf{u}$ que origina otro de deformaciones virtuales $\delta\boldsymbol{\varepsilon}$.

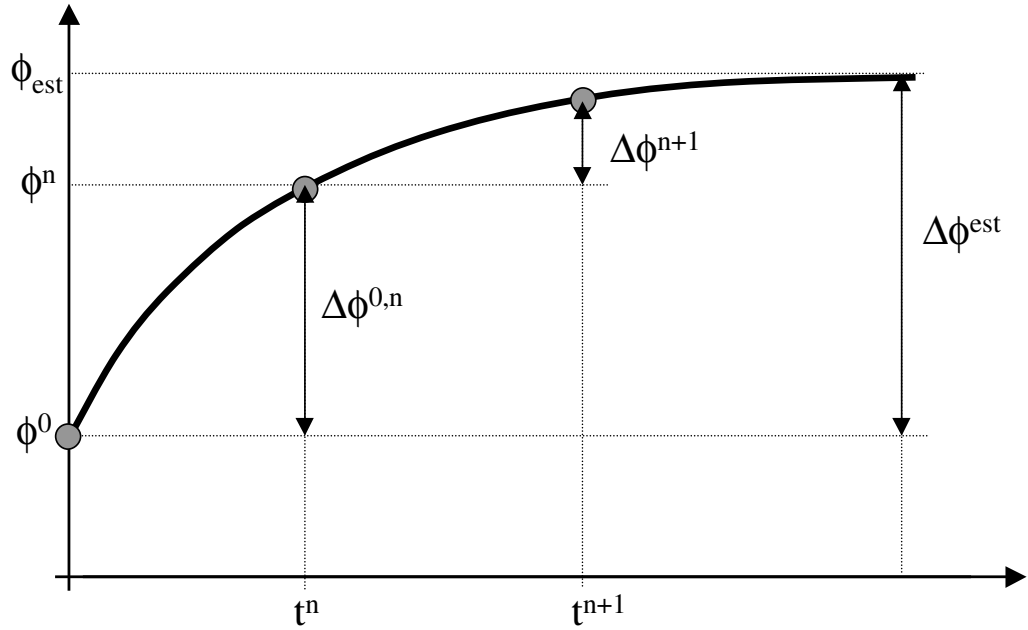


Figura 7.1: Interpretación de las deformaciones térmicas. a) Barra empotrada/libre. b) Barra biempotrada. c) Sólido bidimensional.

Las tensiones existentes en el cuerpo σ se relacionan con las deformaciones “reales” ε que sufre el cuerpo por acción de las cargas, a través de la ecuación constitutiva

$$\sigma = \mathbf{D}(\varepsilon - \varepsilon_o) \quad (7.9)$$

donde ε es el vector de deformaciones totales relacionada con los desplazamientos del cuerpo por la expresión

$$\varepsilon = \mathbf{L}u \quad (7.10)$$

donde \mathbf{L} es un operador diferencial (por ejemplo en una barra $\varepsilon = \frac{du}{dx}$ y $L = \frac{d}{dx}$).

En la ec.(7.9) ε_o es el vector de *deformaciones iniciales* debidas al incremento de temperatura en cada punto del cuerpo. Este vector introduce el acoplamiento entre el problema térmico y el mecánico. Es decir, debido al incremento de temperatura en un punto, se produce una variación de las tensiones a través de la expresión (7.9).

La explicación de la ec.(7.9) es la siguiente. Está aceptado que las tensiones en un sólido elástico son proporcionales a las denominadas *deformaciones elásticas*. Dichas deformaciones son una parte de la *deformación total* que se define para el problema multidimensional por

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon_o \quad (7.11)$$

donde ε , ε^{el} y ε_o son los vectores de deformaciones totales, elásticas e iniciales respectivamente.

El vector de deformaciones iniciales ε_o es función del incremento de temperatura de cada punto $\Delta\phi$. Según se defina dicho incremento, se obtiene un significado diferente para ε_o (ver ecs.(7.3)–(7.7)). Por ejemplo en un problema tridimensional

$$\varepsilon_o = \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{Bmatrix} = \alpha \Delta\phi \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (7.12)$$

donde α es el *coeficiente de dilatación térmica* del sólido. Se observa que una dilatación del sólido no provoca deformaciones (ni, por consiguiente, tensiones) tangenciales.

El significado de ε_o es el de la deformación libre de los puntos del sólido. Es decir, la dilatación (o contracción) que sufriría un volumen diferencial que no estuviera sometido a restricciones. Es interesante advertir que en un sólido que pueda deformarse libremente, sin restricciones, por efecto exclusivo de un incremento de temperatura de sus puntos, las tensiones son nulas. La explicación es que en este caso las deformaciones totales ε coinciden con las iniciales ε_o y, por tanto, las deformaciones elásticas que originan tensiones son nulas.

Aclararemos estos conceptos con un sencillo ejemplo del alargamiento de una barra por efectos térmicos.

♣ **Ejemplo 7.1** *Interpretar las deformaciones iniciales con el análisis de la barra de la Figura 7.2 sometida a un incremento térmico uniforme.*

Solución

Consideremos la barra empotrada en un extremo y libre en el otro de la Figura 7.2a. Sometida a un incremento de temperatura uniforme en todos sus puntos, la barra incrementará su longitud inicial l en la cantidad

$$\Delta l = \alpha \Delta\phi l$$

y la deformación (alargamiento) “inicial” es

$$\varepsilon^0 = \frac{\Delta l}{l} = \alpha \Delta\phi$$

Como la barra no tiene el alargamiento impedido, el alargamiento total ε es igual al producido por el incremento térmico, y, por consiguiente, el alargamiento elástico es nulo. Es decir

$$\varepsilon^e = \varepsilon - \varepsilon^0 = \alpha \Delta\phi - \alpha \Delta\phi = 0$$

Por tanto, de (7.9) se deduce que la barra deformada está libre de tensiones.

Consideremos ahora la barra biempotrada de la Figura 7.2b. Para evaluar las deformaciones iniciales supongamos que la barra puede alargarse libremente. En esas condiciones, el “alargamiento inicial” de la barra coincidiría con el considerado en el caso de la barra empotrada/libre, esto es, $\varepsilon^0 = \alpha\Delta\phi$. Por otro lado, al tener la barra impedido el alargamiento total por ser bi-empotrada, se cumple que el “alargamiento elástico” es ahora

$$\varepsilon_x^e = \varepsilon_x - \varepsilon_x^0 = 0 - \alpha\Delta\phi = -\alpha\Delta\phi$$

y, por tanto, de (7.9) se deduce que la barra está sometida a un esfuerzo axial de compresión uniforme de valor $N = E\alpha\Delta\phi$.

Por consiguiente, las deformaciones iniciales térmicas pueden interpretarse como aquéllas que tendría el sólido al deformarse libremente, sin coacciones exteriores y sometido a una deformación axial de valor $\alpha\Delta\phi$ en cada punto (ver Figura 7.2c).

Se deduce, asimismo, del ejemplo de la barra empotrada/libre, que en un sólido exento de coacciones que impidan su deformación libre, una deformación térmica no origina tensión alguna.

7.2.3 Discretización por el método de elementos finitos

La discretización por el MEF de las ecuaciones de gobierno del sólido sigue el proceso usual que se resume brevemente a continuación. Para más detalles, consultar las referencias [6,12].

Discretización del campo de desplazamientos

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\bar{\mathbf{u}} \quad (7.13)$$

donde $\bar{\mathbf{u}}$ es el vector de desplazamientos nodales y \mathbf{N} es la matriz de funciones de forma.

El vector de desplazamientos virtuales se expresa igualmente por

$$\delta\mathbf{u} = \mathbf{N}\delta\bar{\mathbf{u}} \quad (7.14)$$

donde $\delta\bar{\mathbf{u}}$ es el vector de desplazamientos virtuales nodales.

Discretización del vector de deformaciones

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u} = \mathbf{L}\mathbf{N}\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{B}\bar{\mathbf{u}} \quad (7.15)$$

donde $\mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{N}$ es la matriz de deformaciones.

De la misma forma el vector de deformaciones virtuales se expresa por

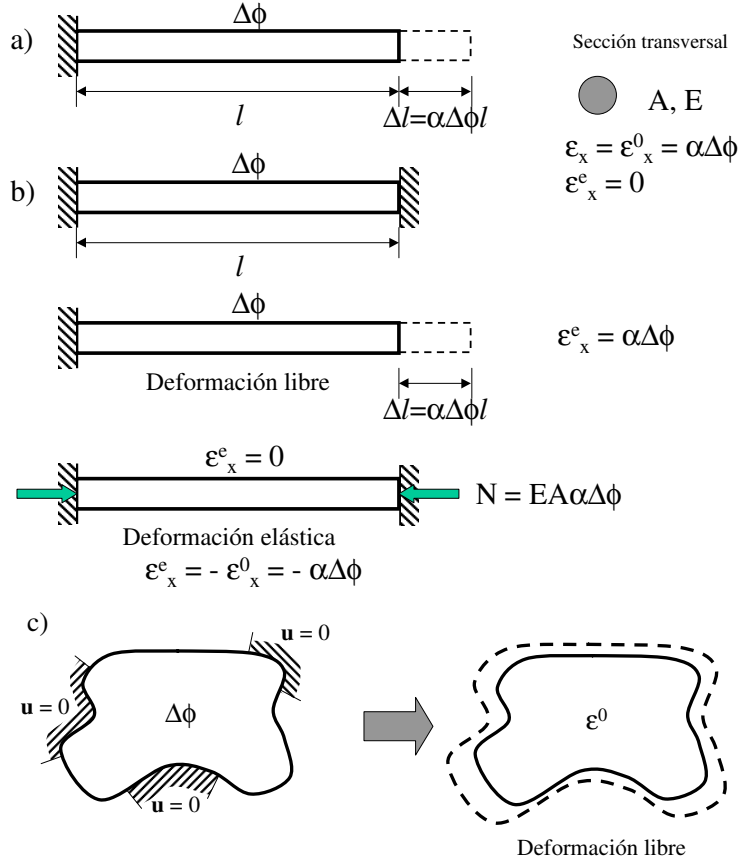


Figura 7.2: Interpretación de las deformaciones térmicas. a) Barra empotrada/libre. b) Barra biempotrada. c) Sólido bidimensional

$$\delta\epsilon = \mathbf{B}\delta\bar{\mathbf{u}} \quad (7.16)$$

Ecuación constitutiva

$$\sigma = \mathbf{D}(\epsilon - \epsilon_o) = \mathbf{D}\mathbf{B}\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{D}\epsilon_o \quad (7.17)$$

Ecuación de equilibrio

Sustituyendo las ecs.(7.13)–(7.17) en la expresión de trabajos virtuales (7.8), se obtienen las ecuaciones de la discretización en la forma usual

$$\mathbf{K}\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{f} \quad (7.18)$$

donde la matriz de rigidez \mathbf{K} y el vector de fuerzas equivalentes nodales se forman por ensamblaje de las contribuciones elementales dadas por

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega \quad (7.19)$$

$$\mathbf{f}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}_o d\Omega + \int_{\Gamma^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{t} d\Gamma \quad (7.20)$$

La segunda integral de la ec.(7.20) incorpora el efecto de la variación de temperatura en el vector de fuerzas nodales.

Una vez obtenidos los desplazamientos nodales $\bar{\mathbf{u}}$ resolviendo la ec.(7.18), se calculan las deformaciones y tensiones en cada punto por las ecs.(7.15) y (7.16), respectivamente.

Las expresiones de las matrices \mathbf{D} y \mathbf{B} dependen de la formulación utilizada para analizar el problema estructural (sólido 3D, sólido 2D, placa, etc.). Asimismo, la matriz \mathbf{N} depende del tipo de elemento finito escogido. En las referencias [6,12] pueden encontrarse los detalles de la aplicación del MEF al análisis lineal de estructuras.

7.2.4 Análisis del problema termo-mecánico unidireccional

Consideraremos la solución del problema termo-mecánico *unidireccional*. Es decir, el análisis tenso-deformacional de un cuerpo bajo la acción de cargas exteriores y variaciones de temperatura conocidas. El acoplamiento se produce en este caso en una única dirección: del problema térmico al mecánico. Es decir, se desprecian las variaciones de la temperatura originadas por la deformación del cuerpo. Estas variaciones hay que tenerlas en cuenta si las deformaciones son importantes, como sucede en problemas de conformado de piezas, donde se producen cambios de forma importantes, que generan incrementos en la temperatura del cuerpo. En este caso el acoplamiento termo-mecánico es *bidireccional*. Otra situación de acoplamiento termo-mecánico bidireccional es en el caso de que la deformación del sólido produzca cambios en las condiciones de contorno en el problema térmico. Un ejemplo de este tipo es el análisis de la solidificación de piezas fundidas. En estos problemas se produce una contracción de la pieza al enfriarse que hace que se separe del molde y cambia el coeficiente de convección térmica en la superficie de la pieza [62,64,65].

Las etapas en la solución por el MEF del problema acoplado termo-mecánico unidimensional son las siguientes.

Etapas 1. Obtención de la evolución de las temperaturas en el cuerpo

Dicha evolución se obtiene resolviendo la ec.(7.1) para el cálculo de la temperatura en los nodos de la malla en cada instante de tiempo t_n . A partir de este valor se calcula en cada nodo el incremento de temperatura con respecto al estado inicial, o con respecto al tiempo anterior.

Etapa 2. Cálculo de los desplazamientos, deformaciones y tensiones en el sólido

En cada caso se calcula el vector de deformaciones iniciales ϵ_o utilizando una u otra definición de incremento de temperatura. Consideraremos las opciones más usuales para el análisis de un sólido 3D.

Incremento de temperatura total

$$\boldsymbol{\varepsilon}_o = \alpha \Delta \phi^{n,o} [1, 1, 1, 0, 0, 0]^T \quad (7.21)$$

Incremento de temperatura entre dos instantes de tiempo sucesivos

$$\boldsymbol{\varepsilon}_o = \alpha \Delta \phi^{n+1} [1, 1, 1, 0, 0, 0]^T \quad (7.22)$$

Incremento de temperatura estacionario

$$\boldsymbol{\varepsilon}_o = \alpha \Delta \phi^{est} [1, 1, 1, 0, 0, 0]^T \quad (7.23)$$

Los diferentes incrementos de temperatura en las expresiones anteriores se definieron en el Apartado 7.2.1.

Si se utiliza la ec.(7.21) se obtienen, al resolver el problema elástico (7.18), los desplazamientos, deformaciones y tensiones en el tiempo t_n . Utilizando la ec.(7.22) se obtienen los incrementos de dichos valores entre dos instantes de tiempo sucesivos. Dichos valores pueden añadirse a los obtenidos en un instante de tiempo anterior en un proceso de cálculo incremental. Por otra parte, si se escoge la ec.(7.23) se obtiene directamente el estado tenso-deformacional del sólido al alcanzarse el valor estacionario de la temperatura. Esta última opción es la más recomendable en la práctica, siempre que se tenga la certeza de que existe una solución estacionaria, y no se desee información sobre la evolución en el tiempo de las deformaciones y las tensiones en el sólido.

La implementación práctica del proceso de cálculo anterior es muy sencilla, e implica únicamente el intercambio de las temperaturas nodales obtenidas de la solución del problema térmico, que pasan a ser datos en la solución del problema elástico.

7.3 PROBLEMAS TERMO-MECÁNICOS BIDIRECCIONALES

Como ya se ha comentado anteriormente, si se producen grandes deformaciones en el sólido, o cambios en las condiciones de contorno térmicos durante la deformación, se produce un acoplamiento termo-mecánico bidireccional. Esto es, la variación de la temperatura provoca cambios en el estado tenso-deformacional del sólido, y estos cambios, a su vez, inducen alteraciones en la distribución de la temperatura.

Este acoplamiento bidireccional conduce a un problema no lineal de alta complejidad. La solución numérica del problema exige resolver conjuntamente las ecuaciones acopladas del problema térmico y el mecánico utilizando un algoritmo iterativo de Newton-Raphson para calcular la temperatura y las

variables mecánicas (desplazamientos, deformaciones y tensiones) en cada incremento de tiempo.

Los detalles de la solución del problema termo-mecánico acoplado bidireccional se salen de los objetivos de este texto introductorio. Los interesados en este tema pueden encontrar información al respecto en las referencias [6,62,64,65].

7.4 ACOPLAMIENTO TÉRMICO EN FLUIDOS

La temperatura juega un papel esencial en el comportamiento de un fluido. El estudio del efecto de la temperatura en un fluido exige resolver de manera acoplada la ecuación de transmisión del calor por convección-conducción transitoria, con la de la dinámica de fluidos. El problema es de gran complejidad pues el acoplamiento es generalmente de naturaleza bidireccional, y además las ecuaciones de fluido contienen usualmente términos no lineales. Presentaremos seguidamente de forma sucinta las ecuaciones fundamentales y el proceso de solución por el MEF.

Para mayor simplicidad consideraremos únicamente el caso de un fluido incompresible.

7.4.1 Ecuaciones de gobierno del problema acoplado

Ecuación de conservación del movimiento en el fluido

$$\rho \left[\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - b_i - \rho g_i [1 - \alpha(\phi - \phi_o)] = 0 \quad (7.24)$$

Ecuación de conservación de la masa (incompresibilidad)

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (7.25)$$

Ecuación de transmisión del calor

$$\rho c \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - Q = 0 \quad (7.26)$$

En las ecuaciones anteriores v_i , b_i y g_i son la i -ésima componente de la velocidad en el fluido del vector de fuerzas másicas, y del vector de gravedad, respectivamente, c es el calor específico a presión constante y α es el coeficiente de expansión volumétrica del fluido. El último término del primer miembro de la ec.(7.24) surge de la denominada aproximación de Boussinesq. Las tensiones en el fluido se relacionan con las velocidades a través de la ecuación constitutiva

$$\sigma_{ij} = 2\mu \dot{\epsilon}_{ij} - \delta_{ij} p \quad (7.27)$$

donde μ es la viscosidad del fluido, p la presión, δ_{ij} el delta de Kroeneker y

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (7.28)$$

El resto de los términos en las ecuaciones (7.24)–(7.26) se ha definido con anterioridad.

Las ecs.(7.24–7.26) se completan con las condiciones de contorno adecuadas. Con el problema térmico (ec.(7.26)) dichas condiciones son las usuales del problema de convección-conducción transitorio (Capítulo 4). Para los detalles de las condiciones de contorno del problema de fluidos se recomienda consultar la ref. [6].

El acoplamiento en las ecs.(7.24–7.26) se produce usualmente a través de los términos siguientes:

1. A través del término $\rho g \beta \phi$ en las ecuaciones de conservación del movimiento. Dicho término introduce directamente el efecto de la temperatura en las ecuaciones del fluido. La inclusión de este término es usual para estudiar problemas de convección del aire en recintos.
2. A través del término convectivo $\left(\rho c v_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)$ en las ecuaciones del problema térmico. Este término introduce el efecto de la velocidad del fluido en la transmisión del calor.

Otros términos que inducen el acoplamiento térmico en fluidos

El acoplamiento entre el problema térmico y el de flujo del fluido puede originarse también por

- (a) Dependencia de la viscosidad del fluido μ con la temperatura. Esta dependencia es típica en problemas de flujo de metales o plásticos fundidos durante procesos de llenado de moldes. A medida que el metal se enfría la viscosidad aumenta rápidamente, lo que repercute en el campo de velocidades en el fluido.
- (b) Dependencia del término de fuente térmica Q , con las velocidades del fluido. Esta dependencia es usual en el estudio de flujo plástico/viscoplástico de sólidos. Estos problemas son típicos de procesos de conformado de metales y plásticos (extrusión de metales, inyección de plásticos, etc.). El metal se considera en su deformación como un fluido de alta viscosidad. El movimiento de las partículas del sólido origina un trabajo de deformación que se transforma parcialmente en calor, originando un incremento de la temperatura. El término Q en estos casos se evalúa por

$$Q = J \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} \quad (7.29)$$

donde J es la proporción de trabajo mecánico que se transforma en calor (usualmente $J \simeq 0.7 - 0.9$).

Adicionalmente, pueden producirse en el fluido fenómenos de cambio de fase que alteren el calor específico, introduciendo altas no linealidades. Este efecto se trataría con las técnicas estudiadas en el Capítulo 6.

7.5 Solución del problema acoplado por el método de elementos finitos

La solución de las ecs.(7.24)–(7.26) por el MEF es compleja y su estudio se sale de los objetivos de este texto introductorio. Daremos seguidamente las ideas generales de las etapas esenciales de la solución.

Parte de la complejidad mencionada se debe a las dificultades de resolver adecuadamente las ecuaciones de un fluido viscoso incompresible. Dichas dificultades se deben fundamentalmente a la presencia de términos convectivos no lineales en la ecuación de conservación del movimiento (que inducen la turbulencia para velocidades altas) y a la necesidad de satisfacer la condición de incompresibilidad (ec.(7.15)). Para sortear estos problemas se han propuesto innumerables métodos numéricos [6]. Asimismo las ecuaciones de fluido pueden simplificarse en algunos casos prescindiendo de los términos convectivos (flujo de Stokes) o bien de los términos viscosos (flujo de Euler).

Una opción usual en el MEF es utilizar la denominada formulación de *velocidad-presión*. En este caso se toman las velocidades y la presión como variables fundamentales del problema del fluido. Dichas variables se interpolan por

$$\mathbf{v} = \sum_j N_j^v \bar{\mathbf{v}}_j \quad (7.30)$$

$$p = \sum_j N_j^p \bar{p}_j \quad (7.31)$$

En las ecuaciones anteriores N_j^v y N_j^p son las funciones de forma utilizadas para interpolar los campos de velocidades y de presión, respectivamente y $(\bar{\cdot})$ indica valores nodales.

Por otra parte, la temperatura se interpola en la forma usual por

$$\phi = \sum_i N_i^\phi \bar{\phi}_i \quad (7.32)$$

donde N_i^ϕ son las funciones de forma utilizadas para interpolar el campo de temperaturas.

Sustituyendo las ecs.(7.30)–(7.32) en las ecs.(7.24)–(7.26) y utilizando métodos de residuos ponderados [6] se obtiene un sistema de ecuaciones acoplado que puede escribirse por

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{C}_2 \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}} \\ \bar{\mathbf{p}} \\ \bar{\phi} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} [\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2(\mathbf{v})] & \mathbf{Q} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & [\mathbf{K}_c(\mathbf{v}) + \mathbf{K}_d] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}} \\ \bar{\mathbf{p}} \\ \bar{\phi} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_v \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{f}_\phi \end{Bmatrix} \quad (7.33)$$

En la ec.(7.33) \mathbf{C}_1 y \mathbf{C}_2 son las matrices que surgen de los términos en derivadas temporales en las ecs.(7.24) y (7.26), respectivamente, \mathbf{K}_1 es una matriz que depende de la viscosidad del fluido y la matriz $\mathbf{K}_2(\mathbf{v})$ surge de los términos convectivos en (7.24). La matriz \mathbf{Q} surge del término en que interviene la presión, \mathbf{K}_c y \mathbf{K}_d son, respectivamente, las matrices de convección y conducción en el problema térmico (Capítulo 4) y \mathbf{f}_v y \mathbf{f}_ϕ son los vectores de fuerzas nodales en los problemas de fluido y térmico, respectivamente. En la referencia [6] pueden encontrarse los detalles de obtención de estas matrices.

La ec.(7.33) incluye todos los acoplamientos entre los problemas de fluido y térmico antes mencionados. Dicha ecuación se resuelve en el tiempo utilizando un esquema de integración temporal implícito o explícito (ver Capítulo 3). Debido a las no-linealidades inducidas por los distintos acoplamientos, así como por la no linealidad intrínseca del término convectivo en el fluido, debe utilizarse un algoritmo iterativo para encontrar la solución dentro de cada incremento de tiempo. Una opción usual es utilizar un algoritmo predictor-corrector del tipo explicado en el último apartado del Capítulo 5.

Otra alternativa es utilizar un algoritmo *escalonado* para resolver el sistema acoplado (7.53). Para ello se separan las ecuaciones del fluido y del problema térmico como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}} \\ \bar{\mathbf{p}} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} (\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) & \mathbf{Q} \\ \mathbf{Q}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{v}} \\ \bar{\mathbf{p}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_v \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \quad (7.34)$$

$$\mathbf{C}_2 \frac{d\bar{\phi}}{dt} + (\mathbf{K}_c + \mathbf{K}_d)\bar{\phi} = \mathbf{f}_\phi \quad (7.35)$$

El esquema *escalonado* “explícito” más sencillo se basa en calcular los valores de las velocidades y la presión en el tiempo t_{n+1} integrando la ec.(7.34) utilizando valores de la temperatura en t_n . Tras ello se integra la ec.(7.35) para el cálculo de $\bar{\phi}^{n+1}$ utilizando los valores de $\bar{\mathbf{v}}^{n+1}$ y $\bar{\mathbf{p}}^{n+1}$ calculados de (7.34) y así sucesivamente. Naturalmente, en problemas altamente no lineales, es preciso iterar dentro de un incremento de tiempo para encontrar los valores de $\bar{\mathbf{v}}^{n+1}$, $\bar{\mathbf{p}}^{n+1}$ y $\bar{\phi}^{n+1}$ que satisfagan las condiciones de balance en el tiempo t_{n+1} . Dicho proceso iterativo puede efectuarse también de forma escalonada. Para más detalles sobre este tipo de técnicas de solución de problema acoplados no lineales se recomienda consultar las referencias [6,63–65].

Appendix A

CÁLCULO DE LAS INTEGRALES EN FORMA DISTRIBUIDA

Consideremos el cálculo de

$$\int_{\Omega} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega \quad (A.1)$$

donde w_j es una función continua y r es una función definida a nivel elemental y por tanto discontinua entre elementos. Consecuentemente la derivada $\frac{\partial r}{\partial x_j}$ no se encuentra definida a lo largo de la frontera elemental.

La integral (A.1) puede ser evaluada de la siguiente forma

$$\int_{\Omega} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega = \sum_e \int_{\Omega^e} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega + \sum_f \int_{\Gamma_f} w_j \llbracket r \rrbracket n_j d\Gamma \quad (A.2)$$

El primer sumatorio del término de la derecha representa la suma de las integrales evaluadas dentro del dominio de cada elemento, mientras que el segundo sumatorio toma en cuenta los saltos debidos a la discontinuidad de la función r entre los elementos. Este término toma en cuenta la suma de las integrales evaluadas a lo largo de las fronteras compartidas por dos elementos. Los contadores e y f varían respectivamente con el número de elementos y las fronteras elementales existentes en la malla.

La figura A.1 muestra el caso de dos elementos triangulares A y B que comparten una frontera común Γ . Para cada elemento se tomará en cuenta que la normal sobre las fronteras se dirija hacia el exterior del elemento. Debido a que la discontinuidad entre las funciones es evaluado en dirección de la normal, el signo de estas no es relevante en el resultado de (A.2). Dicha discontinuidad para el caso mostrado es

$$\llbracket r \rrbracket = (r)_B - (r)_A \quad (A.3)$$

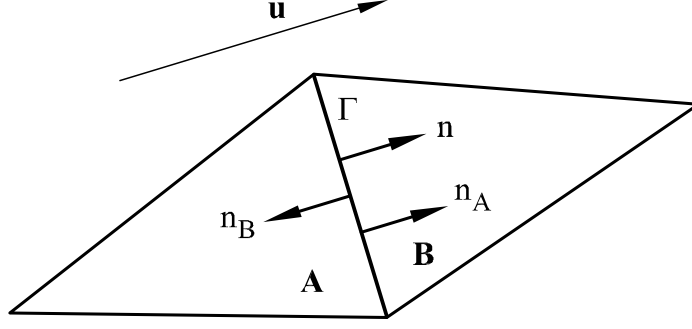


Figura A.1: Frontera común Γ entre elementos adyacentes

donde $(r)_B$ y $(r)_A$ son los valores de r en Γ obtenidos para los elementos B y A , respectivamente. Si el signo del vector normal cambia, el signo de la discontinuidad (A.3) también lo hará de manera que el signo del producto $\llbracket r \rrbracket n_j$ permanecerá constante.

La integral de la discontinuidad a lo largo de Γ puede ser obtenida como la contribución de todos los elementos que comparten el lado Γ

$$\int_{\Gamma} w_j \llbracket r \rrbracket n_j d\Gamma = \int_{\Gamma_B} w_j r_B n_j d\Gamma - \int_{\Gamma_A} w_j r_A n_j d\Gamma \quad (\text{A.4})$$

En este caso Γ_B representa el contorno Γ en el elemento B , mientras que Γ_A corresponde al mismo lado visto desde el elemento A . De la Figura A.1 se observa que $\mathbf{n}_A = \mathbf{n}$ y $\mathbf{n}_B = -\mathbf{n}$. Sustituyendo en (A.4)

$$\int_{\Gamma} w_j \llbracket r \rrbracket n_j d\Gamma = - \int_{\Gamma_B} w_j r_B n_{Bj} d\Gamma - \int_{\Gamma_A} w_j r_A n_{Aj} d\Gamma \quad (\text{A.5})$$

Consecuentemente la integral de la discontinuidad sobre Γ puede ser separada en dos integrales, cada una involucrando los términos asociados a cada uno de los elementos que comparten el lado. La suma de dichas integrales para todos los lados de los elementos puede expresarse, en función de las integrales a lo largo de las fronteras elementales como

$$\sum_f \int_{\Gamma^f} w_j \llbracket r \rrbracket n_j d\Gamma = - \sum_e \int_{\Gamma^e} w_j r n_j d\Gamma + \int_{\Gamma} w_j r n_j d\Gamma \quad (\text{A.6})$$

donde Γ^e representa a los tres lados del elemento e , mientras que Γ corresponde a las fronteras del grupo de elementos que coinciden con la frontera de Ω . La segunda integral del término de la derecha de (A.6) aparece debido a que las discontinuidades han sido consideradas entre dos elementos adyacentes y no sobre la frontera Γ . Sustituyendo (A.6) en (A.2) se obtiene

$$\int_{\Omega} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega = \sum_e \left[\int_{\Omega^e} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Gamma^e} w_j r n_j d\Gamma \right] + \int_{\Gamma} w_j r n_j d\Gamma \quad (\text{A.7})$$

El último paso consiste en integrar por partes las integrales sobre el dominio de cada elemento como

$$\int_{\Omega^e} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega = - \int_{\Omega^e} \frac{\partial w_j}{\partial x_j} r d\Omega + \int_{\Gamma^e} w_j r n_j d\Gamma \quad (A.8)$$

Sustituyendo (A.8) en (A.7) se obtiene finalmente

$$\int_{\Omega} w_j \frac{\partial r}{\partial x_j} d\Omega = - \sum_e \int_{\Omega^e} \frac{\partial w_j}{\partial x_j} r d\Omega + \int_{\Gamma} w_j r n_j d\Gamma$$

REFERENCIAS

- [1] M.N. Ozisik, *Basic Heat Transfer*, McGraw-Hill Book Company, New York, USA, 1977.
- [2] L.C. Burmeister, *Convective Heat Transfer*, John Wiley and Sons, New York, USA, 1983.
- [3] J.P. Holman, *Heat Transfer*, McGraw-Hill Book Company, New York, USA, 1990.
- [4] W.J. Minkowycz, E.M. Sparrow, G.E. Schneider and R.H. Pletcher (eds.), *Handbook of Numerical Heat Transfer*, John Wiley and Sons Inc., New York, 1998.
- [5] S.V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow (Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences)*, ed. Minkowycz, W.J. & Sparrow, E.M., Hemisphere, Washington, 1980.
- [6] Zienkiewicz, O.C. y Taylor, R.L., *El Método de los Elementos Finitos*, CIMNE-McGraw Hill, Vol I (1993), Vol II (1994).
- [7] Reddy, J.N. and Garthling, D.K., *The finite element method in heat Transfer and fluid dynamics*, CRC Press, 1994.
- [8] H.C. Huang and A.S. Usmani, *Finite element analysis for heat transfer*, Springer-Verlag, 1994.
- [9] O.C. Zienkiewicz and E. Oñate, “Finite elements versus finite volumes. Is there really a choice?”, in *Nonlinear Computation Mechanics. State of the Art*, P. Wriggers and W. Wagner (Eds.), Springer Verlag, Berlin 1991.
- [10] E. Oñate, M. Cervera and O.C. Zienkiewicz, “A finite volume format for structural mechanics”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **37**, pp. 181–201, 1994.
- [11] S. Idelsohn and E. Oñate, “Finite volumes and finite elements: two ‘good friends’ *Int. Journal Num. Meth. Engng.*, Vol. **37**, pp. 3323–3341, 1994.
- [12] E. Oñate, *Cálculo de Estructuras por el Métodos de Elementos Finitos*, CIMNE, Barcelona, 1995.

- [13] E. Hinton, T. Rock and O.C. Zienkiewicz, "A note on mass lumping and related processes in the finite element method", *Earthquake Engng. Struct. Dynamics*, **4**, **3**, 245–249, 1976.
- [14] T.J.R. Hughes, *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*, Prentice-Hall International, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1987.
- [15] C. Hirsch, *Numerical Computations of Internal and External Flow*, John Wiley & Sons, Vol. 1, 1988; Vol. 2, 1990.
- [16] I. Christie, D. Griffiths, A.R. Mitchell & O.C. Zienkiewicz, Finite Element Methods for Second Order Differential Equations with Significant First Derivatives, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **10**, pp. 1389–96, 1976.
- [17] J.C. Heinrich, P.S. Hayakorn & O.C. Zienkiewicz, An Upwind Finite Element Scheme for Two Dimensional Convective Transport Equations, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **11**, pp. 131–143, 1977.
- [18] D.W. Kelly, S. Nakazawa, O.C. Zienkiewicz & J.C. Heinrich, A Note on Upwind and Anisotropic Balancing Dissipation in Finite Element Approximation to Convective Diffusion Problems, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **15**, pp. 1705–1711, 1980.
- [19] J.C. Heinrich, On Quadratic Elements in Finite Element Solutions of Steady State Convection-Diffusion Equations, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **15**, pp. 1041–1052, 1980.
- [20] A.N. Brooks & T.J.R. Hughes, Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convective Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations, *Comput. Meth. in Appl. Mech. and Engng.*, **32**, pp. 199–259, 1982.
- [21] S.R. Idelsohn, Upwind Techniques Via Variational Principles, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **28**, pp. 769–84, 1989.
- [22] T.E. Tezduyar & D.K. Ganjoo, Petrov-Galerkin Formulations With Weighting Functions Dependent Upon Spatial and Temporal Discretization: Applications to Transient Convection-Diffusion Problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, **59**, pp. 49–71, 1986.
- [23] T.J.R. Hughes & M. Mallet, A New Finite Element Formulations for Computational Fluid Dynamics: III. The Generalized Streamline Operator for Multidimensional Advective-Diffusive Systems, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **58**, pp. 305–328, 1986.
- [24] C.C. Yu & J.C. Heinrich, Petrov-Galerkin Method for Multidimensional Time Dependent Convection-Diffusion Equations, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **24**, pp. 2201–2215, 1987.

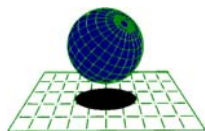
- [25] R. Codina, E. Oñate, & M. Cervera, The Intrinsic Time for the SUPG Formulation Using Quadratic Elements, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg*, **94**, pp. 239-262, 1992.
- [26] R. Codina, A Finite Element Formulation for the Numerical Solution of the Convection-Diffusion Equation, Monografía CIMNE, **14**, 1993.
- [27] S.R. Idelsohn, J.C. Heinrich & E. Oñate, Petrov-Galerkin Methods for the Transient Advective-Diffusive Equation With Sharp Gradients, *Int. J. Num. Meth. Engngn.*, **39**, pp. 1455–1473, 1996.
- [28] T.J.R. Hughes, L.P. Franca & G.M. Hulbert, A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: VIII. The Galerkin/Least-Squares Method for Advective-Diffusive Equations, *Comput. Meth. in Appl. Mech. Engng.*, **73**, pp. 173-189, 1989.
- [29] R. Codina, Comparison of Some Finite Element Methods for Solving the Diffusion-Convection-Reaction Equation, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg*, **156**, pp. 185-210, 1998.
- [30] T.J.R. Hughes, Multiscale Phenomena: Green's Function, the Dirichlet-to-Neumann Formulation, Subgrid Scale Models, Bubbles and the Origin of Stabilized Formulations, *Comput. Meth. in Appl. Mech. and Engng.*, **127**, pp. 387-401, 1995.
- [31] F. Brezzi, L.P. Franca, T.J.R. Hughes & A. Russo, $b = \int g$, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engn.*, **145**, pp. 329–339, 1997.
- [32] T.J.R. Hughes, G.R. Feijoo, L.Mazzei & J.B. Quincy, The Variational Multiscale Method: A Paradigm for Computational Mechanics, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engn.*, **166**, pp. 3–24, 1998.
- [33] F. Brezzi, M.O. Bristeau, L.P. Franca, M. Mallet & G. Rogé, A Relationship Between Stabilized Finite Element Methods and the Galerkin Method With Bubble functions, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engn.*, **96**, pp. 117–129, 1992.
- [34] L.P. Franca & C. Farhat, Bubble Functions Prompt Unusual Stabilized Finite Element Methods, *Comput. Meth. in Appl. Mech. and Engng.*, **123**, pp. 299-308, 1994.
- [35] F. Brezzi, D. Marini & A. Russo, Pseudo Residual-Free Bubbles and Stabilized Methods, *Computational Methods in Applied Sciences '96*, J. Periaux *et al.* (Eds.), Jhon Wiley & Sons, 1996.
- [36] F. Brezzi, D. Marini & A. Russo, Applications of the Pseudo Residual-Free Bubbles to Stabilization of Convection-Diffusion Problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg*, **166**, pp. 51-63, 1998.

- [37] E. Oñate, Derivation of Stabilized Equations for Numerical Solution of Advective-Diffusive Transport and Fluid Flow Problems, *Comput. Meth. in Appl. Mech. Engng.*, **151**, pp. 233-265, 1998.
- [38] E. Oñate, J. García & S. Idelsohn, Computation of the Stabilization Parameter for the Finite Element Solution of Advective-Diffusive Problems, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **25**, pp. 1385-1407, 1997.
- [39] E. Oñate, J. García & S. Idelsohn, An Alpha-Adaptive Approach for Stabilized Finite Element Solution of Advective-Diffusive Problems With Sharp Gradients, *New Adv. in Adaptive Comp. Met. in Mech.*, P. Ladeveze & J.T. Oden (Eds.), Elsevier, 1998.
- [40] E. Oñate, "On the stabilization of numerical solution for advective-diffusive transport and fluid flow problems", Publicación CIMNE n. 81, Octubre 1996.
- [41] E. Oñate, "Formulación de elementos finitos estabilizada para problemas de transporte convectivo y flujo incompresible mediante técnicas de cálculo finitesimal", *Métodos Numéricos en Ingeniería*, R. Abascal, J. Domínguez y G. Bugeda (Eds.), España, 1999.
- [42] E. Oñate, "Elementos finitos y volúmenes finitos. Puntos de encuentro y posibilidad de nuevas aplicaciones", Publicación CIMNE n. 142, Octubre 1998.
- [43] E. Oñate & M. Manzan, "Stabilization techniques for finite element analysis of convection-diffusion problems", Publicación CIMNE n. 183, Febrero 2000.
- [44] T.J.R. Hughes & M. Mallet, A new finite element formulations for computational fluid dynamics: IV. A Discontinuity Capturing Operator for Multidimensional Advective-Diffusive System, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **58**, pp. 329-336, 1986.
- [45] A.C. Galeao & E.G. Dutra do Carmo, A Consistent Approximate Upwind Petrov-Galerkin Method for Convection Dominated Problems, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **68**, pp. 83-95, 1988.
- [46] R. Codina, A Discontinuity-Capturing Crosswind Dissipation for the Finite Element Solution of the Convection-Diffusion Equation, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **110**, pp. 325-342, 1993.
- [47] O.C. Zienkiewicz & J.Z. Zhu, The Supercorvergent Patch Recovery (SPR) and Adaptive Finite Element Refinement, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **101**, pp. 207-224, 1992.
- [48] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab & X.D. Li, Error Estimation and Adaptive Procedures Based on Superconvergent Patch Recovery (SPR), *Archives of Computational Methods in Engineering*, **4** (3), pp. 203- 242, (1997).

- [49] J. Donea, A Taylor-Galerkin Method for Convective Transport Problems, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **20**, pp. 101–119, 1984.
- [50] O.C. Zienkiewicz & R. Codina, A General Algorithm for Compressible and Incompressible Flow. Part I: the Split, Characteristic Based Scheme, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **20**, pp. 869–885, 1995.
- [51] S. DelGuidice, G. Comini and R.W. Lewis, “Finite element simulation of freezing processes in soils”, *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **2**, 223–235, 1978.
- [52] P.E. Frivik, E. Thorbergsen, S. DelGuidice, and C. Cornini, “Thermal design of pavement structures in seasonal frost areas”, *Journal of Heat Transfer*, **99**, 533–540, 1977.
- [53] H.C. Huang and R.W. Lewis, “Adaptive analysis for heat flow problem using error estimation techniques”, In *Sixth International Conference for Numerical Methods in Thermal Problems*, Swansea, U.K., July 1989. Pineridge Press, Swansea.
- [54] J. Crank, *Free and Moving Boundary Problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [55] A.J. Dalhuijsen and A. Segal, “Comparison of finite element techniques for solidification problems”, *Int. J. Num. Meth. Engng.* **23**, 1807–1829, 1986.
- [56] J. Crank, “How to deal with moving boundaries in thermal problems”, In R.W. Lewis, K. Morgan and O.C. Zienkiewicz (eds.), *Numerical Methods in Heat Transfer*, Wiley, Chichester, 1981.
- [57] K. O’Neil and D.R. Lynch, “A finite element solution of freezing problems using a continuously deforming coordinate system”, In R.W. Lewis, K. Morgan and O.C. Zienkiewicz (eds.), *Numerical Methods in Heat Transfer*, Wiley, Chichester, 1981.
- [58] J. Yoo and B. Rubinsky, “Numerical computation using finite elements for the moving interface in heat transfer problems with phase transformation”, *Numerical Methods in Heat Transfer*, **6**, 209–222, 1983.
- [59] M. Salcudean and Z. Abdullah, “On the numerical modelling of heat transfer during solidification processes”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **25**, 445–473, 1988.
- [60] V.R. Voller, C.R. Swaminathan and B.G. Thomas, “Fixed grid techniques for phase change problems”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **30**, 875–898, 1990. Special thermal issue.
- [61] R.W. Lewis and P.M. Roberts, “Finite element simulation of solidification problems”, *Applied Scientific Research*, **44**, 61–92, 1987.

- [62] Celentano, D. Oñate, E. and Oller, S., “A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **37**, 2441–2465, 1994.
- [63] Celentano, D., *Un modelo termomecánico para problemas de solidificación en metales*, Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España, 1994.
- [64] D. Celentano, S. Oller y E. Oñate, “A coupled themomechanical model for the solidification of cast metals”, *Int. J. Solids Structures*, **33**, n. 5, 647–673, 1996.
- [65] M. Chiumenti, *Constitutive Modelling and Numerical Analysis of Thermo-mechanical Phase Change System*, Tesis Doctoral, Barcelona, 1998.
- [66] R.W. Lewis, K. Morgan and O.C. Zienkiewicz, “An improved algorithm for heat conduction problems with phase change”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **19**, 1191–1195, 1978.
- [67] W.D. Rolph and K.J. Bathe, “An efficient algorithm for analysis of non-linear heat transfer with phase change”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **18**, 119–134, 1982.
- [68] J. Roose and O. Storrer, “Modelization of phase changes by fictitious heat flow”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **20**, 217–225, 1984.
- [69] R. Viskanta, “Phase change heat transfer”, In G.A. Lane (ed.), *Solar Heat Storage Latent Heat Materials*, CRC Press, 1983.

Secretaría del Curso de Master:



C I M N E

Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería
Edificio C1, Campus Norte UPC, Gran Capitán s/n
08034 Barcelona, España
Tel: 34-93 401 60 39 - 93 205 70 16
Fax: 34-93 401 65 17
e-mail: lelia@cimne.upc.edu
web: <http://centrov.cimne.upc.es/cdl1>